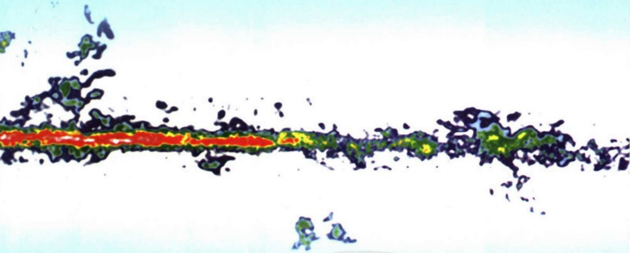
高等学校教学用书

分子天体物理学基础

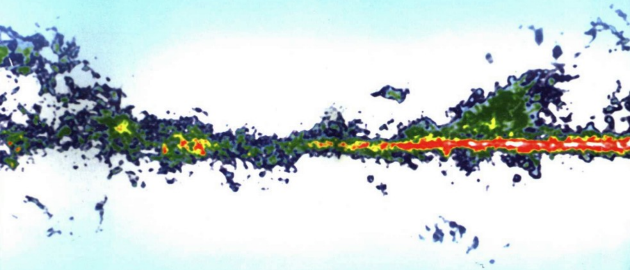
（上 册）

孙　锦　李守中　编著



北京师范大学出版社

责任编辑/李桂福
封面设计/李葆芬



ISBN 7-303-06410-9
9 787303 064106 >

ISBN 7-303-06410-9/O・254
定价：15.00 元

高等学校教学用书

分子天体物理学基础

（上册）

孙 锦 李守中

北京师范大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

分子天体物理学基础/孙锦,李守中编著.—北京:北京师范大学出版社,2003.5
高等学校教学用书
ISBN 7-303-06410-9

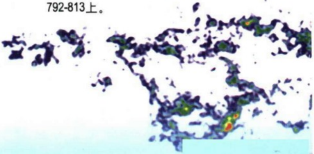
Ⅰ.分… Ⅱ.①孙…②李… Ⅲ.分子物理学:天体物理学-高等学校-教材 Ⅳ.P14

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 019243 号

北京师范大学出版社出版发行
(北京新街口外大街 19 号 邮政编码:100875)
出版人:常汝吉
北京师范大学印刷厂印刷 全国新华书店经销
开本:850mm×1 168mm 1/32 印张:9.5 字数:228 千字
2003 年 5 月第 1 版 2003 年 5 月第 1 次印刷
印数:1～1 000 定价:15.00 元

封面图说明

银河系的一个新的、大尺度的CO分子辐射空间分布图。由美国Cambridge天体物理中心（CfA）和托洛洛山美洲天文台（CTIO）的两台1.2米毫米波望远镜共同观测完成。是至今最完整的银河系CO巡视。图中不同颜色代表不同的CO（J=1-0）谱线发射积分强度。其中白色最强，依次是红、黄、绿、蓝……等色。该图引自：Dame, T.M.等的文章：The Milky Way in Molecular Clouds：A New Complete CO Survey, 刊登在2001年的ApJ, 547：792-813上。





前 言

分子天体物理学也称分子天文学是20世纪70年代后蓬勃发展起来的一门新学科，是天体物理学的一个重要分支. 它通过天文分子谱线所提供的丰富信息研究各类天体的形态、结构、物理状态、化学性质和演化. 它的发展大大推动了恒星与星际物质的相互作用以及恒星乃至星系的形成和演化的研究，并促进了一大批天体物理难题的解决.

本书系统讲述分子天体物理学研究的基础理论、基本方法和主要研究领域，分上、下两册. 上册内容有：天文分子谱线产生的物理机理，具体天体物理环境下分子谱线的辐射转移，天体脉泽辐射的基本理论以及利用天文分子谱线获取天体物理信息的方法等；对分子天体物理学发展的精彩纷呈的历史和主要研究成果在上册绪论中也有介绍. 下册内容有：分子云，天体脉泽源，分子云与恒星形成，晚期演化星拱星包层的分子发射以及星际物质化学等；有关天文分子谱线的观测与证认在下册的附录中介绍.

20世纪60年代四大天文发现之一——星际分子的发现导致了分子天体物理学的诞生. 它的诞生使天文学进入一个新的阶段. 天文学家得以从分子着手来研究宇宙中发生的各种现象. 而在这之前，大部分天体物理学的内容是以原子物理、原子光谱的手段来研究的，可以称之为原子天体物理学. 分子天体物理学的研究需要有关分子波谱、天体脉泽、天文分子谱线辐射转移以及星际分子形成和瓦解的物理、化学过程，分子云的动力学和力能学等诸多方面的知识，它们是深入了解和研究宇宙中各类有分子存在的天文环境的基础.

国内外曾有过一些讲习班系统介绍这方面的知识. 最有代表性的是 1974 年在欧洲举办的 Summer School，即后来出版的 Les Houches Sess XXVI："Atomic and Molecular Physics and The Interstellar Matter" 一书. 但该书时间较早. 类似的书还有：T.R.Carson 和 M.J. Roberts 所编：Atom and Molecules in Astrophysics (1972 年)，内容似较窄些. 近年来的一些会议文集或专题讲座也有涉及分子天体物理基础知识的，如：Millimeter-Wave Astronomy：Molecular Chemistry & Physics in Space (Proceedings of the 1996 Inaoe Summer School) 和 The Galactic Interstellar Medium (Saas-Fee Advanced Course 21, Lecture Notes 1991) 等. 它们都是该领域的很好的参考书，但作为教材尚缺乏系统和完整，理论部分则缺乏详细的推演，学生学起来有一定的困难. 关于天体脉泽方面的著作有两部，即：A.H.Cook 所著：Celestial Masers (1977 年) 和 M.Elitzur 所著：Astronomical Masers(1991 年). 它们都属于专著性质，特别是后者，是学习天体脉泽理论极好的参考书，但作为教科书似过于详尽. 本书从教科书的要求出发，在结构安排上注意了内容的系统性和完整性. 对一些重要的内容除了有比较详细的公式推导外，加强了物理概念和物理过程的阐述，以使学生更好地理解和把握所学内容的物理实质，并对其在天文上的进一步的应用和研究进展也有基本的了解. 通过本书的学习学生将掌握从事分子天体物理学研究所必备的基础知识和方法，学会从观测到的分子谱线中获取所需要的天体物理信息，开展有关的分子天体物理学课题的研究.

本书是在作者多年来在北师大和天文台讲授"分子天体物理学导论"的讲义 (1991 年) 和在北大讲授"天文分子微波谱基础"讲义的基础上修改而成的，它可作为天体物理学专业研究生的基础课教材，也可作为高年级学生的专业选修课教材，同时也可供有关专业，如天体物理、天体化学以及分子波谱等专业的科

研人员参考.

本书的写作和出版得到了许多方面的支持和帮助. 北京师范大学何香涛教授、李宗伟教授、马文章教授，北京大学周道祺教授对本书的出版始终予以热情的支持和关心；中国科学院紫金山天文台向德琳研究员在百忙中仔细审阅了全书的初稿，并提出了宝贵的意见；加拿大 Calgary 大学 Sun Kwok 教授对本书的写作也给予有益的交流和帮助；中国科学院北京天文台沈良照研究员提供了有用的信息；在天文分子的分类、命名工作中，北京大学的张滂院士、叶秀林教授、李崇熙教授、林垚教授、林新村教授等给予了仔细认真的指导和讨论．在此一并表示由衷的感激. 此外多年来许多天文界的同行，老师和同学们都一直关注本书的出版，对此我们深表谢意.

由于我们的水平和涉足的研究领域有限，书中不妥之处希望得到读者和同行们的批评与指正. 本书的责任编辑李桂福编审为本书的出版提出了宝贵意见，并付出了辛勤劳动，特致以诚挚的感谢.

作者　2002 年 9 月

目　录

第一章　绪　　论

§1.1　星际分子的发现与分子天体物理学的兴起

1.1.1　对星际物质的认识和研究

分子天体物理学(molecular astrophysics)习惯上常被人们称为分子天文学(molecular astronomy)并作为天体物理学的一个重要分支. 但近年来的进展表明,分子天体化学(molecular astrochemistry)已经成为它的不可分割的重要组成部分. 在这个领域中,天文过程、物理过程和化学过程是如此紧密地结合并且互相渗透以至于在实际问题中有时很难加以区分. 在这个意义上,用分子天文学这个名称来概括这个新型的交叉学科或许更恰当些. 分子天体物理学应用物理学及化学的理论、方法和技术,通过天文分子的发射或吸收谱线所提供的信息来研究各种天体的形态、结构、物理状态、化学性质,研究恒星和星际物质的相互作用及天体(包括恒星及星云)形成和演化的规律. 天文分子存在于各种特定的天文环境中. 广义地说,它应该包括恒星大气,太阳系中行星的大气,彗星以至各种以凝聚态形式存在的天体(如陨石、月岩、行星、小行星、卫星等)中的化学分子. 但一般主要是指星际物质(特别是星云、分子云),晚型星的拱星包层以及星系中的气态分子(有时也要考虑其中的尘粒所含的分子或附着在尘粒表面的分子),通常称为星际分子.

恒星之间含有大量的,以稀薄气体和尘粒形式存在于星际空间的物质,称为星际物质(interstellar matter) 或星际介质

(interstellar midium),简称 ISM．银河系中星际物质的总质量约占银河系总质量的 10%,平均密度约相当于每立方厘米 1 个氢原子．按照现代的习惯看法,我们把那些星际气体和尘埃聚集成为数密度超过约每立方厘米 10 个原子(或离子、分子)的区域称为星云．星云以外的区域中更为稀薄(每立方厘米少于 1 个氢原子)的星际物质则常被叫做星际介质．

星云是分布于恒星之间一切非恒星状的气体尘埃云的总称．那些广袤而无定形的叫做弥漫星云(包括发射星云、反射星云和暗星云),它们密度的典型值为每立方厘米几十到几百万个氢原子,线度的典型值约为 3 到 300 光年,其中巨分子云是银河系中最大的天体．星云质量一般在 10 到 10^6 个太阳质量之间．其中相当一部分物质是以分子形式存在的．分子天体物理学中所说的分子云通常是指那些数密度大于 10～100 cm^{-3}、主要成分是分子、从观测角度看边界相对比较明显的致密的弥漫星云．除了弥散星云以外,银河系中呈云状的天体还有拱星包层(也叫星周包层)、行星状星云、超新星遗迹(超新星剩余物质云)等．它们都是恒星晚期演化过程中,由恒星抛射出来的物质变为星际物质的产物．在这些天体中也发现了各种星际分子．

拱星包层是晚型星周围由于可观的物质抛射而形成的光学厚的气体尘埃层,主要成分是分子和尘埃,是分子天体物理学的重要研究对象．有人广义地把它们也称作拱星分子云．但由于它们的物理、化学特性与星际分子云差别较大,我们把它们作为单独的一类来讨论而不归入分子云．

有关星际物质和星云的这些概念现在已经成为天文常识,但历史上却是在经历了漫长的探索之后才逐渐被人们普遍承认的．

早在 18 世纪末,赫歇耳(F. W. Herschel)已经观察到弥散星云并且看到银河中黑斑和暗条形成的“洞”和“缝”．而巴纳德(E. E. Barnard)用照相方法普查银河时也发现很多暗区．这些直

观的结果使一些人想到了星际物质的存在[1]. 他们认为暗区并不是没有星而是因为星被暗星云所遮盖. 这种看法后来经过许多人的仔细研究,到了 20 世纪 30 年代,终于被多数人同意并且确定这些暗星云物质是来自星际而与恒星无关. 即使如此,在相当一段时间内仍然有不少人认为除了暗星云所在的天区外,星际空间是完全透明的. 可见,要确认星际物质的存在,还需要依靠充分的观测证据和严谨的理论分析.

在这个问题上,星际物质的光谱研究是最直接也最有说服力的. 1904 年哈特曼(J. Hartman) 首先注意到猎户座 δ 分光双星的周期性频移光谱中有一条钙离子 Ca Ⅱ 的无频移吸收谱线. 他提出这可能是来自位于双星和太阳之间的钙离子云. 斯里弗(V. M. Slipher) 于 1909 年更详细地讨论了 Ca Ⅱ 谱线的星际起源的可能性并且预言了可能存在类似的无频移钠原子吸收谱线. 10 年后,星际钠原子 Na Ⅰ 的谱线果然被发现了. Ca Ⅱ 和 Na Ⅰ 的这 4 条谱线直到 20 世纪 30 年代仍是仅有的星际吸收谱线. 后来,又观测到 Ca Ⅰ, K Ⅰ, Fe Ⅰ 和 Ti Ⅱ 的星际谱线.

20 世纪 30 年代对星际红化的深入研究又提供了星际物质中存在微小固体颗粒(尘埃)的确切证据. 人们还发现气体和尘埃在银河中的分布不是均匀的而是较多的聚集在形状不规则的星云中. 这样,星际物质的真实面貌便逐渐展露出来.

在此期间,另一项有关的进展是发现了宇宙线并了解了它的性质.

星际物质及其物理条件的理论研究起始于爱丁顿(A. S. Eddington)的奠基性工作[2],他肯定了上述 Ca 和 Na 的吸收谱线是由存在于星际空间的稀薄气体中的这些原子产生的. 1937 年,他甚至进一步得出星云成分中可能有相当一部分是以分子形式存在的结论. 不过爱丁顿承认,在写到分子时他是相当犹豫的. 他说因为他还没有摆脱"原子是物理而分子是化学"这种传统看法. 幸

好，后来的科学家逐渐懂得了不应过分拘泥于化学、物理学和天文学之间的传统界线. 我们将看到，分子天体物理学正是在这些学科间的相互交叉、相互配合和相互渗透的过程中发展起来的.

1.1.2 星际分子发现简史

20 世纪 30 年代以前，已经在彗星中证认了 CN，CH，CH^+，OH，C_2，NH，CO^+，N_2^+这 8 种分子的谱线，在行星大气甚至太阳和恒星大气中也观测到多种分子谱线（例如参见参考资料[3，4]）. 但这些都不是星际的谱线. 1934 年，梅里尔(P. W. Merrill)在 Ca 和 Na 的星际原子谱线之后，又看到 4 个新的弥散星际光谱带(DIBs)[5]. 罗素(H. N. Russell)猜想它们来自星际的分子[6]. 之后，对它们曾有过各种各样猜测，至今已过去 60 多年，DIBs 仍是个谜，弄不清它应归属于哪种分子. 尽管如此，它们却向天文学家强烈提示星际空间存在分子的可能性.

1937 年，敦哈姆(T. Dumham)和阿当斯(W. S. Adams)[7]用美国威尔逊山天文台当时最新的 100 英寸折轴望远镜和高色散摄谱仪所做的观测中，有 3 条很锐的星际紫外吸收线(表 1.1)，他们未能给出证认. 有人猜想它们属于 CO_2，Na_2 和 NaK，不久都被否定. 但其中的 4 300 Å 谱线很快被斯温司(P. Swings)和罗森费尔德(L. Rosenfeld)正确地证认为 CH 谱线[8]. 这样，CH 成为第一个被发现的星际分子.

1941 年有几位科学家一起讨论了剩下的 4 233 Å，3 958 Å 和亚当斯于 1940 年观测到的 3 745 Å，及 3 579 Å 一共 4 条谱线的归属. 有人猜测它们是 CH_2 的谱线而赫兹堡(G. Herzberg)等考虑到它们与 BH 谱线的相似性建议可能来自 CH^+. 不久道格拉斯(A. E. Douglas)和赫兹堡用 CH^+的实验室光谱测量确证了这个看法[9].

另外，麦克科拉(A. McKellar)在 1940 年预言了 4 条 CN 的

谱线[10]，第二年亚当斯果然在蛇夫座ζ星方向观测到这些谱线.他还在蛇夫座ζ星观测到CH的另外3条位于3 870 Å谱带中的谱线，这就使星际CH分子的证认得到了更加可靠的根据[11].

这样，1940年前后共有CH，CH^+和CN三种星际分子得到确认(见表1.1). 这个状况持续了大约四分之一个世纪.

表1.1 星际分子的早期发现

星际分子	谱线的波长	天文观测的日期	得到证认(或预言)的日期
CH	4 300.31 Å	1937，[7]	1937，[8]
(次甲基)	3 886.4 Å	1941，[11]	1940，预言[10]
	3 890.2 Å	1941，[11]	1940，预言[10]
	38 ？ ？	1941，[11]	1940，预言[10]
CH^+	4 232.58 Å	1937，[7]	1941，[9]
(次甲基	3 957.74 Å	1937，[7]	1941，[9]
离子)	3 745.33 Å	1940	1941，[9]
	3 579.04 Å	1940	1941，[9]
CN	3 874.6 Å	1941，[11]	1940，预言[10]
(氰基)	3 874.0 Å	1941，[11]	1940，预言[10]
	3 875.8 Å	1941，[11]	1940，预言[10]
	3 873.8 Å	1941，[11]	1940，预言[10]

特别值得一提的是CN分子. 它的极窄的吸收谱线分别来自最低的转动能级和第一、二激发转动能级(即 $N=0$、1、2，见§2.7.3的图2.25). 麦克科拉从谱线的强度比推断这两个能级的激发温度为2.3 K[12]. 事实上，这是暗示宇宙背景辐射存在的第一个观测证据，但当时并没有人能够理解这一点*. 直到1965年彭齐亚斯(A. A. Penzias)和威尔逊(R. W. Wilson)的微波背景辐射

* 例如在参考资料[4]第八章第四节(中文版392页)中，作者提到星际CN的转动温度为2.3 K时，认为"这个温度当然只有很有限的意义". 可以说，这反映了20世纪50年代初期科学界对这个问题的认识.

观测结果出来之后，它的宇宙学意义才被人们重新认识. 分析表明，在实验误差的范围内，上述转动能级的激发温度应该等于或者非常接近宇宙背景温度. 如果是这样，则转动能级间跃迁的微波谱线将不能从宇宙背景辐射中显现出来. 后来彭齐亚斯等(1972 年)和麦耶(D. M. Meyer)等(1984 年)分别用毫米波和光学望远镜对蛇夫座 ζ 星方向的星际 CN 分子作了更加精确的测量，证实了 CN 的温度确实是宇宙微波背景辐射的温度 2.7 K. 这可以认为是利用分子精确探测星云物理条件的第一个实例. (参考资料[13], p. 50～53 中，对有关 CN 转动能级温度的观测和理论分析的研究过程有一个扼要的介绍.)

遗憾的是，星际分子研究的重大意义在第一批星际分子发现后的二十多年中并没有受到足够的重视，许多天文学家对星际分子的研究持怀疑态度. 当时普遍的看法是，在星际物质那样苛刻的天文环境中，不可能产生和存在丰度大到足以被观测到并且在天文上也有意义的化学分子. 1951 年一项计算的结论是[14]，密度很低的星云中，即使是最简单的双原子分子通过气相反应形成的概率也是很小的，而紫外辐射却能使已形成的分子很快解离. 按这个计算，甚至连已观测到的 CH 和 CH^+ 的丰度都不能解释，更不用说那些较为复杂的分子了.

此外，在 20 世纪 40 年代，适于检测分子谱线的红外和射电望远镜还处于发展的早期阶段，天文观测工作受到仪器条件的限制. 这些因素使得天文分子的研究在很长一段时间内被搁置起来，几乎被人遗忘.

二次大战后微波及雷达技术被广泛应用于基础研究，推动了微波波谱学和射电天文学的发展. 1951 年实现了星际氢原子 21 cm 微波谱线的检测，天文谱线扩展到射电波段. 氢原子谱线的观测取得的丰硕成果使天文学家懂得微波特别宜于研究低温和致密的星云，这种云不发射可见光谱线而且对可见光不透明，而微波谱

线却能提供星云深部的信息. 什克洛夫斯基(I. S. Shklovskii)在1949年提出[15],除氢原子21 cm微波谱线外,还有可能在暗星云中找到OH,CH和SiH的分子微波谱线,并且粗略估算了这些谱线的波长(与光学波段不同,当时微波谱线的接受设备大多是窄带的,需要预先知道波长值). 1954年,在微波波谱学方面造诣很深的物理学家汤斯(C. H. Townes)再次提出寻找星际OH[16a],并且算出OH的一条谱线频率应在1 665 MHz附近. 1955年,他又列举了17种星际分子的候选者及其微波频率[16b]. 其中,OH基态$J=3/2$,$\Delta F=0$两条主线的频率的预言值是1 665和1 667 MHz. 首先考虑OH的原因是因为氢是宇宙中丰度最大的元素,而氧是其余元素中丰度最大的之一,组合成OH的机会较大.

星际分子微波谱线天文观测的先驱是汤斯及其合作者. 1956年,巴瑞特(A. H. Barrett)等[17]首先用NRL(美国海军研究实验室)的50英尺射电望远镜找寻星际OH. 他们对准仙后座A(一个著名的超新星遗迹,是强度仅次于太阳的射电源. 对准亮的射电源是为了便于得到吸收谱线.)在1 667 MHz附近25 MHz的频率范围内仔细地搜索但没有得到任何发射或吸收谱线. 人们曾怀疑失败的原因是OH谱线频率可能不在上述频段. 为此厄恩斯坦(G. Ehrenstein)和汤斯等1959年在实验室中精确测定了OH基态两条主线,频率分别为(1 667.34 ±0.03)MHz和(1 665.46±0.10)MHz[18]. 可见巴瑞特所用的频率是正确的,问题可能在于所观测的方向OH谱线不够强,而所用的接受机(比较型辐射计)又不够灵敏. 后来知道,仙后座A是个不幸的选择. 如果那时他们指向其它射电源(比如W3附近)就能提前7年得到强的OH发射谱线*.

---

* 据汤斯回忆(参考资料[22],p. 3),巴瑞特(当时是个年轻的博士后)的系主任曾向汤斯说:"你推荐他给我们,可看来他惟一想做的只是那个哪儿也没找到的OH. 他已经失败了一次,我担心他的前途."那时人们确实不相信能够找到OH,也不理解它的重要性.

1963年10月，巴瑞特与威因雷伯(S. Weinreb)等合作，用威因雷伯在他的博士论文中刚刚研制成功的一种新型的自相关数字式谱线接受机装在一个84英尺抛物面天线上再次指向仙后座(Cas) A，终于检测到OH基态两条主线(1 665 MHz，1 667 MHz)的微波吸收谱线(图1.1)[20]. 这项历史性的发现被誉为20世纪60年代天文学上的四大发现(中子星，2.7 K微波背景辐射，类星体和星际分子微波谱线)之一. 它打开了一个新的、丰饶广阔的研究领域——分子天体物理学和分子天体化学.

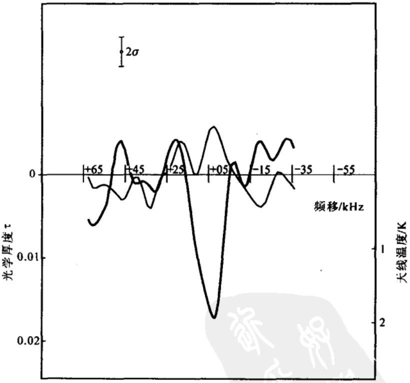


图1.1　仙后座A的1 667 MHz的OH吸收谱(图中粗线)，望远镜偏离仙后座A时的结果见细线.

1964 年,波耳顿(J. G. Bolton)等[21]和巴瑞特等[22]再次证认了星际 OH 基态的两条主线并找到另外两条伴线(1 612 MHz 和 1 720 MHz)的星际吸收线. 这两条伴线的发现先于地球上的实验室. 1965 年,威弗尔(H. Weaver)等在电离氢区射电源 W3 方向观测到一条极强的 1 665 MHz 谱线,但是却看不到相应的 1 667 MHz 谱线. 他们只好认为这是一种"神秘元素(mysterium)"产生的谱线[23]. 后来的研究表明,这种谱线来自 OH 分子的受激发射. 产生这类谱线的射电源被称为天体微波激射源或天体脉泽源(celestial maser)("MASER",是 Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation 的缩写). 它的发现是分子天体物理学历史上的最重要的事件之一(见图 1.2).

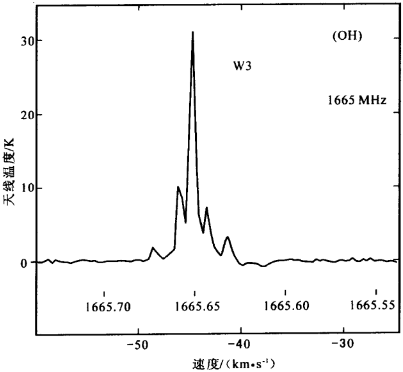


图 1.2 W3 的 1 665 MHz 的 OH 强发射谱.

尽管OH的观测获得一系列成果，人们对星际分子所持的怀疑态度仍然是根深蒂固的．很多人认为，发现OH固然是件大事，但事情也就差不多到头了．这一点从发现OH以后的5年之中并没有人想到去寻找其他星际分子这个事实就可以看出．怀疑的理由是合乎逻辑的：星际空间的极低密度不能提供足够的碰撞；分子将与其背景辐射达到平衡而不会给出净吸收或净发射；想不出合理的机制来产生足够的分子，等等．

1967年底，汤斯离开行政工作到伯克利．他决定试一下在星际空间寻找另一种分子——氨(NH_3)．选择氨的原因一是因为氨是微波波谱学中的典型品种，它具有丰富的强吸收谱线并且有低的亚稳态；二是因为氨的谱线频率位于合适的波段，他们手头正好有良好的K带微波接收设备．另外，在汤斯个人的研究生涯中氨分子起过重要作用也是一个因素．他的小组顺利地在人马座A检测到NH_3谱线（波长约为1.3 cm）[24a]．紧接着，在斯耐德(L. E. Snyder)等的预言和建议下[25a]*，1969年他们又用同样的技术在人马座B2，猎户座A和W49检测到H_2O的强受激发射谱线（波长约1.35 cm）[24b]．同年，斯耐德等观测到H_2CO（甲醛）分子的4830 MHz吸收线[25b]．这是一个有机分子．有趣的是，与这条谱线对应的能级的激发温度竟然低于宇宙背景温度（汤斯因此称之

* 斯耐德和布尔(D. Buhl)当时都是博士后，他们曾向美国国立射电天文台(NRAO)申请使用望远镜天线来寻找星际水分子．但建议未获批准，因为审查委员会认为这将白白浪费天线时间——建议观测的水分子1.35 cm微波跃迁能级位于基态以上456 cm^{-1}（注：此处能量以等效波数cm^{-1}为单位），而处于这个态的分子会很快回到基态．汤斯原来也是这样想的，所以也不曾计划去寻找水分子．但后来他认为这个建议不妨一试——“我们有天线．我们已经找到了氨．水和氨在同一波段，为什么不去找呢？”结果他们竟发现“猎户座准是下雨了！”，那里检测到了完全出乎意料的超高强度的水谱线．它是OH之后的第二种天体微波激射源．斯耐德和布尔失去了在NRAO发现星际水分子的机会，但在伯克利的小组发现水分子之后，NRAO当然立即给他们提供了天线时间．他们决定去找寻另一种星际分子——甲醛．

为“DASAR”，它是 Darkness Amplification by Stimulated Absorption of Radiation 的缩写；或“DASER”，即 De-Amplification by Stimulated Emission of Radiation 的缩写，意为反脉泽）. 这一连串星际分子微波谱线的发现使人们最终接受了这样的事实：即星际气体的密度是足以结合成具有相当丰度的复杂分子的，而且形成的分子也能够抵御各种不利因素（如紫外辐射）的破坏. 到这个时候，先驱者艰难探索取得的成就终于激发了后继者进一步寻找和研究天文分子的巨大信心和兴趣，并且给毫米波射电天文技术和空间天文技术带来了强大的推动力. 分子天体物理学的闸门被冲开了.

进入 20 世纪 70 年代后，一批性能优异的射电望远镜陆续投入观测，空间天文技术也达到更高水平. 1970 年，一个载有小型望远镜和远紫外光谱仪的火箭上天，检测到期待已久的氢分子 H_2 谱线（Carruthers，1970，文献出处见附录 I）. 长期以来人们预言它是星际云中丰度最大的分子，但是由于它没有位于可见和射电波段的共振能级，而位于红外波段的振动谱线和转动谱线的强度都很弱，因而此前一直逃脱了天文检测. CO 和 SiO 的毫米波谱线也被观测到了. CO 谱线较短的波长使它具有更高的空间分辨率，它在宇宙中分布极为广泛因此成为天文研究（包括河外星系）的强有力的探针.

迄今探测到的天文分子（包括分子离子和基）已超过 120 种，一些相当复杂的有机分子，如：CH_2OHCHO（第一个星际糖）和 $HOCH_2CH_2OH$（星际防冻剂）等也在星际云中被探测到了[26a,b,c]（注：有关分子天体物理学资源的更多信息，有兴趣的读者可在

http://www.strw.leidenuniv.nl/~iau34/links.html

和 http://www.cv.nrao.edu/~awootten/allmols.html

等网址上进行搜索）. 在已发现的 120 多种的天文分子中，有不少还观测到相应的同位素分子. 每种分子往往不止测到一条谱线，并

且不止一个源. 人马座 A 和人马座 B2 是著名的天文分子源,大部分已发现的天文分子品种都能在其中找到. 分子源分布在宇宙中各种物理条件不同的区域并且与各种类型的天体成协,这使得它能够提供广泛多样的天文信息.

天文环境中居然能够形成种类如此众多而且以相当大的丰度持久地存在的天文分子,这是一个远远出乎当年科学家们意料的甚至是令人感到难以置信的事实. 以这些分子的谱线为基础的研究给分子天体物理学和分子天体化学带来了深远的影响,并且已经成为天体物理学和天体化学中最重要最活跃的分支之一.

1.1.3 分子天体物理学的研究特点和意义

天文学的对象是极其遥远的天体. 除了陨石、宇宙线中的粒子、登月飞船和行星际探测器对太阳系内的天体所做的直接探测,以及中微子望远镜测到的太阳或超新星发出的中微子这几种极其有限的情况以外,可以说我们全部的天文知识都是来自天体投来的电磁波. 它的波长包含从射频无线电波到 γ 线的大约 16 个量级,天文研究就是观测这些电磁波并根据与产生这些电磁波有关的各种物理、化学原理,从中获得尽可能多的天体信息. 其中,天体电磁波谱线观测尤为重要,它提供了 90%以上的信息.

不过,从 19 世纪中叶夫琅禾费和基尔霍夫研究太阳暗线开始,直到 20 世纪 50 年代以前,谱线观测都局限于光学波段. 这意味着天文学家得到的谱线基本上是来自恒星表面或其它高温天体(如被附近恒星的光激发的亮星云)的中性的或电离的原子光学能级间的发射或吸收跃迁. 从这个意义上说,这一时期的天体物理学中很大一部分可以表述为原子天体物理学. 当然,核天体物理学是另一个重要的研究领域,但它的大量数据基础也仍然是来源于由原子过程形成的恒星光谱的观测.

分子天体物理学的诞生使天文学家得以利用分子谱线观测天

体并且从分子过程着手研究宇宙中发生的各种现象. 由于分子能级结构和谱线的复杂性及多样性,使得分子谱线观测比起原子谱线观测来具有一些特殊的好处.

冷的星云中气体布居在低能态上,因此不能发射可见光范围的谱线,而且,可见光波难以透过致密的星云(虽然星云远比地球大气稀薄,但其尺度可以大到几个光年并含有尘粒,所以能阻挡光波通过),所以,用原子光谱学的手段很难探知星云深处的状况. 分子的电子、振动、转动能级之间的跃迁产生从厘米波、毫米波、亚毫米波到红外、远红外以至远紫外波段的宽广范围的极为丰富的谱线,使天文学家得以用各种不同波段的望远镜进行观测,特别是射电和红外的观测(较长的波长使得它们特别适宜于观测冷的、对可见光不透明的星云). 相应地,得以把被观测的对象从处于演化中期阶段的炽热的恒星扩展到演化早期的星云、星云核、原恒星以及演化晚期的红巨星、行星状星云、超新星遗迹等许多不同类型的天体. 分子天体物理学极大地扩充了人们从电磁波谱线中获得的天文信息,并且填补了天体演化知识中的空白区域.

当然,这一切都必须以天文分子的广泛存在为前提. 出乎人们原先预料的是,分子是一个非常"坚韧"的系统,它能够以有天文意义的丰度产生和存在于看起来非常不利于它的天文环境之中,并且有条件免遭星际紫外辐射等的破坏. 从早期宇宙的复合时代到超新星遗迹,各种各样的天体中都能找到天文分子的踪迹. 它们伴随着恒星的诞生和死亡并且提供演化的标记. 已经用分子观测来研究的对象有星际气体(包括各种星云、分子云及河外星系的星际气体)、银河(结构)、电离氢区、恒星形成区、天体微波激射源、外向流、恒星吸积盘、原恒星、赫比格-阿罗天体、恒星大气、晚型星的星周包层(及质量损失)、行星状星云、新星、超新星喷射物、星风、太阳黑子、彗星、行星及其卫星的大气,在活动星系核、原星系、星暴星系(starburst galaxies)、合并星系(merging galaxies)甚至星系

际空间及类星体中也发现了天文分子.

因此,分子成为诊断它们所在天体的物理条件的强有力的(许多情况下是惟一的)探针. 人们利用它测量温度、密度、速度、磁场以及质量、内部运动、化学组成甚至示踪演化状态. 近年来亚毫米波和红外谱技术的进步使得用更多的分子谱线来示踪分子源的物理参数成为可能. 分子谱线可以示踪气体密度由 10 cm^{-3}到 10^{10} cm^{-3},温度由几开到 3 000 K 的广阔范围,这是原子谱线观测所望尘莫及的. 例如,利用一氧化碳分子在 100 μm～1 mm 波段的转动跃迁谱线可以诊断具有中等密度(n_{H_2}约为 10^4～10^6 cm^{-3}),温度在 100 K～1 000 K 范围的天体的参数. 人们常用它来确定银河系和河外星系中物质的分布;而有极的重陀螺分子 H_2O,HCN,HC_3N 对于密度较高(n_{H_2}约为 10^7～10^9 cm^{-3})的云核和盘是很好的探针;OH,H_2O 和 SiO 的脉泽发射谱线可以作为对分子云中更加致密的区域(例如 n_{H_2}为 10^9～$10^{11}$$cm^{-3}$)的理想探针;$H_2$ 在 2 μm 波长的转振发射谱线则是分子云存在激波物理条件的有力证据.

然而,分子的作用又远远不是仅限于探针. 分子的观测已使我们对星际物质全貌的认识发生了很大的变化. 以银河系为例,现在已经能够证实约有一半左右质量的星际物质是以分子形式(主要成分为 H_2)存在的. 而在离银心 4 000～8 000 pc 的分子环带中,分子物质占星际介质总质量的 90%. 因此分子物质的分布应该更本质地反映银河系物质的分布和结构. 此外在分子物质集中分布的地方分子本身就是演化的主体或主体中的相当一部分. 按照理论分子天体物理学的开拓者之一戴伽诺(A. Dalgarno)的说法:"分子常常控制着(天体的)温度和电离结构,它们的存在能加强或抑制动力学的不稳定性,因而决定性地影响着它们参与构成的天体的演化"(参考资料[13],p. 3). 例如在星云凝聚为恒星(即恒星主序前演化)时所出现的剧烈的能量和物质的运动中,分子就起着举足轻重的作用. 这个过程中的几个关键阶段,如分子云塌缩的开

始，稠密核的形成，被星云吸积盘包围的原恒星的出现和以双极流为主要特征的物质的喷发等，都可以在分子过程和分子谱线中看到相应的反映. 分子云本身的形成、演化及其内部运动直接控制着星的形成. 在恒星形成区的 H_2O 和 OH 分子的强脉泽（它往往是大质量星正在形成的标志）所辐射放出的巨大能量对云的动力学演化会产生重要影响.

对于正在消亡的恒星如 AGB 星（红巨星的渐进巨星分支），由于其可观的质量流失形成了一个由分子和尘埃组成的光学厚的星周包层，它是恒星物质返回星际的表现. 星周包层有效地屏蔽了星际紫外辐射，成为丰富的分子源，这些分子向我们提供了有关包层、中心星的质量抛射及其内部的核燃烧过程的大量信息. 所以特纳(B. Turner)说："分子的研究提供给我们有关恒星是如何从致密的气体中形成又如何死亡以及物质又如何送回星际介质的大部分知识"[27].

分子天文学的发展使天体化学(astrochemistry)的研究上升到一个新的阶段. 过去的天体化学，至少对于太阳系以外的范围而言，实际上主要只是观测了各种天体的化学元素成分及其丰度比，并根据核反应理论提出元素合成的各种过程来分析和解释产生这些丰度比的原因. 它基本上没有涉及元素的化合及化合物的分解，更没有考虑化学过程对天体及其演化的影响. "天体物理学"这个词本身就表明了它是用物理学（而不包括化学）的规律来研究天体. 确实，天体物理学的理论取得了巨大的成功. 例如在恒星演化理论方面，用现有的物理知识基本上能够解释各种不同质量不同元素成分恒星的性质和演化特征；基于相对论和粒子物理学的知识提出的标准宇宙模型能够统一的解释一系列观测事实；等等. 然而，我们显然不能只靠物理规律来讨论和解释各种天体环境中出现的大量的、品种繁多的化学分子的产生过程，也不能只靠物理规律来说明星云或星周包层的化学组成. 研究这些问题要求我们应

用化学规律去弄清不同天文条件下的化学过程，它涉及一系列过去我们并不十分清楚的基元的缔合或解离过程和化学反应. 过去的理论并没有考虑到包含在某些天体演化过程(例如星云向恒星的演化、晚型星星周包层的演化、超新星遗迹的演化等等)中的复杂的化学演化，这些化学演化受到诸如原恒星的辐射，与恒星形成和演化相伴的高速内流和外流所驱动的激波等物理因素的影响，而作为演化结果的各种化学分子又以各自的谱线辐射特征或电离特性等反过来影响天体的演化过程. 在这个意义上讲，天体化学应该是一门和天体物理学相互平行又相互交叉的综合学科.

几十年来，在以戴伽诺为代表的一大批科学家的系统的努力下，这个新领域已经取得了一系列的重要成果. 人们期望，在知道了星云的元素成分和物理条件之后，能够估计出其中产生的各种化合物的量即星际分子的丰度. 如果这个量还依赖于星云的历史——即星云形成的过程、演化的年龄、星云所经历的物理条件如激波和辐射等等，则我们就有可能根据星云现在的分子丰度等状况来推断星云的历史. 这样，星云的化学组成情况便也成为一种探针并且可以用来当作测量星云年龄的时钟.

可以看出，分子天体物理学(包括分子天体化学)的诞生开创了天文学的一个新时代. 30 年来这门学科的蓬勃发展已经证明它对现代天文学的进步发生了深远的影响. 这也是本章后半部分将要讨论的问题. 而全书的重点将放在对分子天体物理学的基本理论和基本方法的介绍方面.

§1.2 天文分子谱线提供的宇宙信息——分子天体物理学的主要研究成果和进展

1.2.1 已发现和证认的天文分子品种及其意义

分子天体物理学的观测向我们提供了丰富多样的天文信息.

其中首先引起关注的，当然是关于发现了天文环境中存在着分子的信息.观测事实消除了人们原先的怀疑，并且还证实了天文分子的品种是出乎意料的多种多样. 本节中 所提到的天文分子品种除了指它们的化学分类外，还扩展到它们所生存的天文环境，这样又有所谓的拱星分子、星际分子以及河内（银河系）分子和河外（星系）分子之分. 本节将分别讨论它们，并扼要介绍它们在天体物理学研究中的意义、研究的进展.本节最后将提到近年来发现和证认的天文固相分子——星际冰.

在迄今已发现的天文分子中，得到证认的天文分子品种已超过 120 种. 其中大多数是含有 C、H、O 元素的分子. 还观测到了分子中某些元素被相应的同位素所取代的同位素分子，它们的谱线频率和超精细结构有所不同. 表 1.2 将这些分子按所含原子数目及发现先后列出（未包括同位素分子）. 它们的中英文名称、化学分类和首次发现的文献见附录 I. 表中所列波段指的是首次发现时所用波段. 随着观测技术的发展，不少分子已在多种波段上探测到. 如：H_2、CO、OH 和 CH_4 等还在红外，C_2 还在可见，HCl 还在射电等波段被测到.现今已检测到了几千条天文分子谱线，其中有一些是 U-谱线（U 表示尚未得到证认，unidentified）.

表 1.2 已观测到的天文分子表

化学符号	波段	发现年份	化学符号	波段	发现年份
	二原子		SiO	射电	1971
CH	可见	1937	SO	射电	1973
CN	可见	1940	NS	射电	1975
CH^+	可见	1941	SiS	射电	1975
OH	射电	1963	C_2	红外	1977
CO	射电	1970	NO	射电	1978
H_2	紫外	1970	HCl	红外	1984
CS	射电	1971	PN	射电	1987

续表

化学符号	波段	发现年份	化学符号	波段	发现年份
* NaCl	射电	1987	C_2S	射电	1986
* AlCl	射电	1987	* CCC	红外	1988
* KCl	射电	1987	SiH_2(?)	射电	1990
* AlF	射电	1987	CH_2	射电	1990
* SiC	射电	1989	C_2O	射电	1991
* CP	射电	1989	* MgNC	射电	1986
* SiN	射电	1990		(1993 证认)	
NH	紫外	1991	**NH_2^+**	射电	1993
SO^+	射电	1992	NH_2	射电	1993
CO^+	射电	1993	* NaCN	射电	1994
HF	红外	1997	N_2O	射电	1994
* SH	红外	2000	**H_3^+**	红外	1996
			* MgCN	射电	1995
	三原子		* SiCN	射电	2000
H_2O	射电	1968	* AlNC	射电	2001
HCO^+	射电	1970			
HCN	射电	1970		**四原子**	
HNC	射电	1971	NH_3	射电	1968
OCS	射电	1971	H_2CO	射电	1969
H_2S	射电	1972	HNCO	射电	1971
C_2H	射电	1974	H_2CS	射电	1971
N_2H^+	射电	1974	C_2H_2	红外	1976
SO_2	射电	1975	C_3N	射电	1976
HCO	射电	1976	HNCS	射电	1979
HNO	射电	1977	**$HOCO^+$**	射电	1980
HCS^+	射电	1980	l-C_3H	射电	1984
HOC^+	射电	1983	C_3O	射电	1984
c-SiC_2	射电	1984	**$HCNH^+$**	射电	1984
H_2D^+	红外	1985	c-C_3H	射电	1985

续表

化学符号	波段	发现年份
H_3O^+	射电	1986
C_3S	射电	1986
* HCCN	射电	1991
H_2CN	射电	1994
CH_2D^+(?)		1993
SiC_3	射电	1999
CH_3	红外	2000
	五原子	
HCOOH	射电	1970
HC_3N	射电	1970
CH_2NH	射电	1972
NH_2CN	射电	1975
H_2CCO	射电	1976
C_4H	射电	1978
CH_4	射电	1978
* SiH_4	红外	1984
c-C_3H_2	射电	1985
CH_2CN	射电	1987
* C_4Si	射电	1989
* CCCCC	红外	1989
l-C_3H_2	射电	1990
HCCNC	射电	1992
HNCCC	射电	1992
H_2COH^+	射电	1996
	六原子	
CH_3OH	射电	1970
CH_3CN	射电	1971
NH_2CHO	射电	1971
CH_3SH	射电	1979
* C_2H_4	红外	1980
C_5H	射电	1986
CH_3NC	射电	1997
HCCCHO	射电	1989
H_2C_4	射电	1990
CCCCCO		1990
$HCCCNH^+$	射电	1994
C_5N	射电	1998
	七原子	
CH_3C_2H	射电	1971
CH_3CHO	射电	1971
CH_3NH_2	射电	1974
CH_2CHCN	射电	1975
HC_5N	射电	1976
C_6H	射电	1986
c-C_2H_4O	射电	1997
	八原子	
CH_3OHCO	射电	1975
CH_3C_3N	射电	1983
C_7H	射电	1997
H_2C_6	射电	1997
CH_3COOH(?)	射电	1997
CH_2OHCHO	射电	2000

续表

化学符号	波段	发现年份	化学符号	波段	发现年份
	九原子		$(CH_3)_2CO$	射电	1987
CH_3CH_2OH	射电	1974	NH_2CH_2COOH(?)	射电	1994
$(CH_3)_2O$	射电	1974	$HOCH_2CH_2OH$	射电	2002
CH_3CH_2CN	射电	1977			
HC_7N	射电	1977		**十一原子**	
CH_3C_4H	射电	1984	HC_9N	射电	1977
C_8H	射电	1996			
				十三原子	
	十原子		$HC_{11}N$	射电	1982?
CH_3C_4CN(?)	射电	1984			1997

注:黑体表示离子分子

* 表示只在晚型星拱星包层中探测到的分子

? 表示已发现但尚未证认的分子

(c)表示环形分子,(l)表示线形分子

可以看出,天文分子大多数是由氢(H)、碳(C)、氧(O)、氮(N)、硅(Si)、硫(S)组成的. 其它元素有氯(Cl)、钠(Na)、钾(K)、铝(Al)、氟(F)和磷(P),不过目前它们大多只出现在晚型星的星周包层中.注意,氢、碳、氧、氮、硫、磷就是所谓"生命元素",它们是构成生物分子的基本成分.

表中既有由两三个原子组成的简单分子,又有由十几个原子组成的比较复杂的有机分子. 最大的气相天文分子是 $HC_{11}N$,它由 13 个原子组成,分子量为 147. 星际 $HC_{11}N$ 的第一次证认后来确定为 1997 年(文献出处见附录 I). 分子量最小的分子是氢(H_2). H_2 虽然是一个最简单的分子,但它和天文学中大多数重要的问题有关,因此它又是天体物理学中最重要的分子. 如:H_2 是宇宙学演化中第一个形成的中性分子,在第一次宇宙学天体的塌缩中起决定性的作用,进而又进一步影响宇宙的演化和星系的形成.

此外，氢分子也是宇宙中最丰富的分子. 无论从空间、时间还是能量上看它都是分布最广的：从分子过程的微过程到银河系最大的天体——巨分子云；从早期宇宙的结构起源到未来将要形成的恒星，氢分子都在其中占有举足轻重的位置. 可惜的是，H_2 没有可见的和射电的谱线，红外波段的振动和转动谱线的电偶极矩跃迁又是禁阻的，只有弱的电四极矩跃迁. 远紫外波段的电子谱线在低温的星云中很难激发也不易透过致密的尘云，因此很长时间人们很难直接用 H_2 来研究分子云，进而研究天体的起源和演化.

近 10 多年来红外、紫外以及空间天文技术的迅速发展，HST (Hubble Space Telescope 哈勃空间望远镜)、ISO (Infrared Space Observatory 红外空间天文台) 和 FUSE (Far UV Spectroscopic Explorer 远紫外分光探测器) 等现代设备的投入使用，使天文分子氢的观测和研究有了极大的进展和突破(详见参考资料[28, 29]). 如 ISO 之前，H_2 的观测只限于激发温度大约 2000 K 的热成分(激波激发区)和光致离解区(PDRs)中的非-热(荧光)激发成分. 方法是观测 H_2 的 2.12 μm 波长上的 $v=1-0$ S(1)谱线以及其它几条近红外波段的转-振谱线. 很少有观测是来自 H_2 的低能量的低转动态的纯转动跃迁. 然而，分子云中大量的 H_2 却在发射这种纯转动的波长在 5～30 μm 间的谱线. 遗憾的是，地球大气在这个波段上又是不透明的. ISO 正好运转在波长大于 2.4 μm 的波段，特别是它的工作在 2.38～45.2 μm 间的短波谱仪(SWS)为观测 H_2 提供了有力的手段. 今天，利用 ISO 空间望远镜已观测到一大批不同类型和不同温度结构的天体. 如 Herbig-Haro 天体，正在形成恒星的分子云，成协的 PDRs，行星状星云，超新星遗迹以及 X-射线激发区(XDRs)等. 不过，已知的氢分子观测还大多只来自暖的 H_2 气体，它只适于探查 1%的或者更少的分子质量，更多的分子物质是冷 H_2 的. 利用灵敏的 FUSE 设备，通过 H_2 的紫外吸收谱，现在已可以检测到它们. 应该提到的是，在这之前，这种冷的

H_2 成分主要是通过 CO 的毫米波发射(见下文),尘埃消光的红外测量以及热尘埃发射等方法间接测量的. 由于种种原因,这些测量使我们经常丢失许多,特别是星系较外部分的冷 H_2 质量. 因此,已有人提出暗物质的一个实质性的部分可能就是这种冷分子氢. 由此看来,氢分子直接测量的另一个潜在重要性就是暗物质的问题[29].

在各种星际分子中,丰度仅次于氢分子(约为 H_2 的 10^{-4}倍)而且对天文研究也非常重要的品种是一氧化碳(CO). 它广泛存在于各种不同的天文环境中,它的毫米波谱线经常被用做测量所在天体的温度和密度的探针. 理论表明,一氧化碳与分子氢是共存的,并且是通过与分子氢的碰撞而激发. 因此人们经常利用 CO 谱线来推断 H_2 的存在与分布. 但需要指出,CO 和 H_2 间的转换比率是相当不确定的. 此外,在一些区域由于 CO 的欠丰富或者所处环境太冷而不能激发. 其结果常常造成低估 H_2 的质量.

其余的星际分子多数是有机的或含碳的分子,在星云中它们的相对丰度比起 CO 是非常地小($<10^{-8}$). 但由于致密星云包含的物质总量极为巨大,所以每种分子的绝对数量都远远大于地球上相应化合物的总数量.

天文分子中,除了有像氧化硅、甲醛、水、氨等一些地球上常见的分子外,还有一大批地球上从未找到过天然样品的分子,如不稳定的分子离子及基(自由基). 其中相当一部分甚至在化学实验室中也难以制备出来. 因此被称为地球外的奇异分子,我们将在下一节中介绍. 苛刻的天文环境中发现大量有机分子曾使天文学家大为惊讶,因为过去一直以为只有在地球这样得天独厚的环境中才能大批地产生有机分子. 在 1970 年检测到甲醇(CH_3OH)之后,人们曾经为能否在星云中找到乙醇(即酒精,CH_3CH_2OH)而打赌. 结果 1974 年竟然在人马座中发现了总量比人类有史以来酿造的全

部酒精还要多的酒精分子*．现在天文有机分子中已经包括醛、酮、醇、酸、酰胺、酯、醚、烯、炔、腈等各类化学特性不同的有机分子．1973年以来的红外观测还发现，宇宙中有一种广泛存在的未知红外(UIR)谱线，波长 $\lambda=3.28, 6.2, 7.7, 8.7, 11.3\ \mu m$．分析表明，它们有可能是来自多环芳香族碳氢化合物(polycyclic aromatic hydrocarbons，简称PAHs，如 $C_{16}H_{10}$(芘)、$C_{18}H_{12}$等)分子，有人认为也可以把它看成是星云中一种极小的颗粒．

20世纪80年代以来，检测到一系列碳链分子．有人认为，或许富勒烯(buckminster fullerenes)，特别是碳60这样的特殊分子也能在天文环境中找到．还有一些研究工作则推测，前面提到的DIBs可能就是来源于碳链分子，碳60或类似碳60的物质[26a,30,31]．

很长一段时间中，检测到的天文分子都是线型结构，1984年首次证实了一个环形分子 SiC_2(c-SiC_2)，它仅存在于晚型星的星周包层中．后来又陆续发现环形的 C_3H_2(c-C_3H_2)和 C_3H(c-C_3H)分子，它们在星际空间中形成的机制是天体化学中一个很有兴趣的问题．

磷是6种生命元素之一，但它的发现比较晚，1987年才在星际中发现了第一个含磷分子PN，其后两年又在星周包层中找到CP．近十几年观测到的SiN则是天文上第一个含Si-N带的分子．它和CP相反，分布于星周包层的较外部分．CP分子的较高的丰度现在尚没有得到解释．

在已发现和证认的大约120多种的天文分子中(不包括同位素)有65种分子已在晚期演化星的拱星包层(circumstellar envelopes 简称CSEs)中探测到了．我们称其为拱星分子或星周分

---

* 汤斯估计，星云中已发现的酒精分子的总和相当于 10^{25} 瓶伏特加(见 参考资料[22]p. 7)．

子(见表 1.3). 大约有一半的拱星分子是在近 15 年内发现与证认的. 其中又有 19 种分子至今只在晚期演化星,如 AGB 星的拱星包层中被探测到,表 1.2 和 1.3 中用“*”号标出. 它们大多与卤族元素和硅元素有关. 这一事实说明拱星包层的物理、化学性质与星际介质(ISMs)有很大的不同. 晚型星的拱星包层有相对简单的物理结构(大的球形几何、由中心星的质量抛射确定的密度分布以及近乎等速膨胀的运动学),因此晚型星拱星包层分子的观测提供了一个应用和检验天体化学模型的理想实验室. 分子作为星际介质和恒星形成与演化的示踪器,它在追踪恒星的晚期演化,揭示晚期演化星拱星包层所特有的物理、化学性质上也都起着极其重要的作用(详见 1.2.6 节).

表 1.3 在晚期演化星拱星包层中探测到的分子

无机的稳定分子								
CO	* NaCl	H_2S	NH_3	* SiH_4	H_2	C_2		
CS	* KCl	H_2O						
SiO	* AlF	SO_2						
SiS	* AlCl	OCS						
有机的稳定分子								
HCN	CH_3CN	HC_3N	CH_4	C_2H_2	* C_2H_4	H_2CO		
* NaCN	HCCNC							
活性分子								
碳链分子	HC_5N	HC_7N	HC_9N	* HCCN				
	* CCC	* C_4Si	* CCCCC	H_2C_4				
同素异构分子	HNC							
自由基	C_2H	l-C_3H	C_4H	C_5H	C_6H	C_7H	C_8H	* SH
	* SiN	OH	SO	CN	C_3N	C_5N	C_2S	C_3S
	* AlNC							
	* CP	* MgNC	* MgCN	H_2CN	* SiC	C_3Si	* SiCN	
环形分子	c-C_3H	c-SiC_2	c-C_3H_2					
离子分子	HCO^+	CO^+	NH_2^+	CH^+				

在星际分子云中可以探测到的分子又称作星际分子(见表1.2和1.3中不带"*"号的分子). 星际分子与恒星形成区成协,通常可在两类星际分子云中探测到. 它们的谱展示出相当宽阔的物理条件和化学组成. 这第一类云是冷致密云,如金牛座分子云(TMC-1). 其温度$T\approx10$ K,密度$n(H_2)\approx10^4 cm^{-3}$,消光$A_V\approx10$ mag. 在这类云中已观测到大量的、线性的不饱和分子,如:碳链分子,HC_3N、HC_5N、HC_7N、HC_9N、$HC_{11}N$ 、C_nH ($n=2\sim8$);含硫分子,C_2S、C_3S 以及 C_2O、C_3O 和碳烯(carbenes)H_2CCC、H_2CCCC等. 此外还观测到不少含氘的(D-bearing)分子,它们的 D/H 比率是宇宙的 D/H 比率(1.5×10^{-5})的 $10^3\sim10^4$ 倍. 第二类云是热的分子云核. 观测表明,在致密分子云核中形成的星将加热其周围的物质使云核的温度升高至100 K以上. H_2 分子密度达到 $10^5\sim10^8$ cm^{-3}. 人们称其为"热核". 热核通常与HII区成协. 此时,被嵌埋的刚形成的大质量星不仅加热其母云中的气体,还加热周围的尘埃粒子,特别是引起了其附近部分尘粒覆盖物的蒸发,从而导致一批分子发射线在"热核"中探测到. 但和上述冷的暗云核不同,在"热核"源中观测到的是丰富的饱和分子和比较复杂的有机分子. 如:较小的分子 H_2O、NH_3、H_2S 和 CH_4 以及较大的分子 CH_3OH、C_2H_5OH、C_2H_5CN 和$(CH_3)_2O$ 等[32]. 这些分子的丰度至少比冷云的高出 10^3 倍. "热核"分子是近年来分子天体物理学观测和理论研究的热点. 热核的研究可以带给我们许多有关颗粒化学和热气相化学的知识. 它也是探察大质量恒星形成区物理条件的重要工具.

在恒星形成区中还观测到另外一些具有特殊天体物理意义的分子. 这些分子对了解分子云中恒星的形成是极其必要的. 如用CS、NH_3 和 HC_3N 等分子谱线可以示踪分子云中的致密气体的结构;用 CS 和 HCO^+等转动线可显示分子云核塌缩的谱征. 由于恒星是由分子云的稠密核引力塌缩而形成,因此这些谱线的观测直

接提供了恒星正在形成的信息．而H_2、SiO、HCN和CN等分子的发射谱则是调查分子云激波物理的最好手段[33]．

1971年在河外星系NGC253和M82中发现了星际分子OH，第一次把分子观测扩展到河外星系．此后差不多所有在银河系中具有强发射或吸收谱线的分子都在其它星系中检测到了．目前探测到分子气体的星系有上千个．得到证认的分子约25种，其中包括CO，H_2O，H_2，CH，CS，HCN，HCO^+，NH_3和H_2CO，CH_3CN等．一些分子的同位素种类也在星系中观测到了．利用这些分子所发射的谱线，我们可以在一个非常宽阔的范围内研究星系的物理条件．在所有星系的分子谱线中，虽然最重要的应该是氢分子的谱线，但最容易观测的、研究的最多的仍然是CO分子的$J=1-0$和$J=2-1$的谱线以及OH分子的脉泽发射线．和银河系一样，CO分子也是星系H_2的一个最好示踪器．CO的积分强度已被大多数天文学家作为星系总分子质量的探针，利用它已测量了几百个河外星系的分子气体质量分布．而HCN和其它高密度探针分子则常被用来示踪星系中的稠密分子云核(其密度$n(H_2)>10^4\ cm^{-3}$)，它们是星系中恒星形成的潜在位置．它与活动星系核以及星暴星系的研究密切相关．

分子气体的探测对确定星系的形态和演化有决定性的作用．对研究星系的相互作用也有重要意义．星系中分子云的分布和总体特性的研究还可改进人们对恒星形成和分子云演化大尺度过程的理解．特别有意义的是在更远的星系，如超亮的红外星系和高红移星系中探测分子．它对了解分子云、恒星乃至星系本身的早期演化极为关键[33]．过去，我们关于“晚的早期-宇宙”(即红移$Z\approx1\sim5$)中潜藏着大量气体的知识几乎都是来自类星体的光学吸收谱．1991年Brown和Vanden Bout在红移$Z=2.3$的IRAS弱源10214+4724中探测到了CO(3−2)的谱线发射，这是第一次在高红移的星系中发现的分子发射线[34]．而最精彩的结果是对$Z=$

4.69 的类星体 BR1202-0725 的高 J-CO 谱线以及尘埃 1.3 mm 连续谱的测量[35,36]. 它是宇宙中最远天体之一. 在高红移星系中 CO 观测的成功标志着对宇宙早期阶段气体的大量集中进行直接的观测是可能的. 同时也证明早期宇宙的条件是适于星暴发生的[37].

除了气相分子外,星际物质中还有以固态形式存在的分子,我们称其为星际冰.根据红外波段上分子振动带的吸收特征,在指向背景场星或者更多情况下指向年轻恒星天体(YSOs)时人们探测到了星际冰.来自 YSOs 的辐射将周围的尘埃加热到几百开,从而产生了一个亮的连续谱背景. 而处于冷包层的冰则可在谱的吸收特征上被发现. 红外空间天文台(ISO)的短波光谱仪(SWS)的使用大大推进了星际冰的发现和证认. 它使我们对覆盖在尘埃粒子上的星际冰以及尘粒有机物的成分有了一个几乎完整的了解[26a].

图 1.3 展示的就是一个典型的 ISO-SWS 谱,它是在指向 W 33A(一个有名的嵌埋的大质量年轻星)时得到的[26a]. 该谱的波长范围:2.4～20 μm,平均谱分辨率:$\lambda/\Delta\lambda \approx 1\,000$. 由图可见,该谱最强和最宽的两个吸收特征处于 3 μm 和 10 μm 附近,它们分别对应 H_2O 冰和硅酸盐的贡献,并分别代表了尘粒冰覆盖物和尘粒核的主要成分. 该谱中还有多种含碳(Carbon - bearing)的分子被探测到. 如:4.67 μm 上的 CO,4.27 和 15 μm 上的 $^{12}CO_2$ 以及 4.39 μm 上的 $^{13}CO_2$. 此外,还可看到弱的 CH_3OH,OCS,CH_4 的吸收特征和尚未证认的含 CN 的分子或离子(XCN). 固相的 NH_3 是难以探测的,它在 3 μm 上的特征因 H_2O 在此处的宽带吸收而受阻. 此外从理论上考虑,O_2 和 N_2 应是丰富的,但由于它们没有固有的电偶极矩,因此很难在红外上探测到它们.

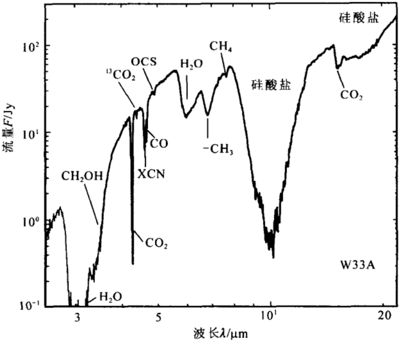


图 1.3 嵌入源 W 33A 在 2.4～20 μm 波段上的 ISO - SWS 谱. 由硅酸盐(silicate)尘粒和冰覆盖物(固态分子)引起的吸收特征已标明. (图中 Jy(央斯基)为辐射流量的单位，$1Jy=10^{-26}W\cdot m^{-2}\cdot Hz^{-1}$.)

1.2.2 地球外的奇异分子

当人们刚刚开始接受了“星际物质中存在分子”的观念并着手大规模的观测活动时，20 世纪 70 年代初又发生了另外一件令人惊奇的事情：在许多分子源中意外地检测到两条频率约为 89 GHz 的地球上从未见过的强谱线. 当时无法确定这两条谱线的归属，只好称之为 U-89 谱线，并认为它是某种未知物质 X-ogen 和 Y-ogen 的特征谱线(仿照 hydrogen——氢的写法). 这件事告诉人们：星际物质中不仅存在着分子，而且还存在着地球上没有见过的分子. 几年之后，终于证实它们分别是 HCO^+(甲酰离子)和 HNC(异氰化氢)的特征谱线.

地球外分子就是指在地球环境中找不到天然样品甚至实验室中也难以制备出来的分子. 其中有些在化学字典中都查不到它们的名字.出现这种情况的一种原因是:这些分子是化学上很不稳定的离子分子或基(自由基).在地球上,它们会很快地与周围环境中的其它物质化合而消失,而在星际空间的超高真空、超低温、天文时空尺度这种地球上无法模拟的特殊物理、化学环境中,它们的形成率却能够超过破坏率因而维持长期的、大量的存在.表1.2中所列的分子离子和自由基以及一些碳链分子,如早期发现的 N_2H^+,CH^+和后来发现的 C_5H 和 C_6H 等都属此类.

星云中出现大量的离子分子和自由基,表明在这些星云的星际化学过程中,离子-分子反应起着重要的甚至是主要的作用. 离子分子的观测是星际化学特别是激波化学中的一个重要课题. 例如 1986 年发现 1992 年得到确认的 SO^+就是星际激波效应的产物,而 H_3O^+则是星际 O 和 H_2O 化学演化中的一个关键性的分子. H_2O 是分子云的重要冷却剂,它对恒星形成区的热动力学起重要作用,因此人们多年前就开始在星云中搜寻 H_3O^+,它的存在已经在 1992 年得到证认.

地球上找不到某些天文分子品种的另一个原因是,这些化合物的蒸气压极低,在地球上无法得到气相的分子.而在某种特定的天文条件下,它们可以通过一定的机制产生.简单的双原子分子碳化硅(SiC)就是一例. 地球上并不缺少固体碳化硅,但从未得到过气相的化合物. 赫兹堡早在 20 世纪 30 年代就企图在实验室中产生气态的碳化硅并找寻它的光学谱线,从那时起近 60 年过去,没有人取得成功. 70 年代陆续检测到了由 C、O、Si、S 四种元素组合而成的星际双原子分子 CO(1970)、CS(1971)、SiO (1971)、SO (1973)、SiS (1975),但是惟有 SiC 仍多次逃脱了射电望远镜的搜索. 直到 1989 年,射电天文学家在富碳星 IRC+10216 的星周包层中找到了怀疑是属于 SiC 的 U-谱线. 在量子化学家和实验室波

谱学家的合作下，终于证实它就是找寻已久的SiC[38].

在分子天体物理学的早期，地外奇异分子的U-谱线常常是天文学家在针对特定的分子谱线进行“正常”观测时，在附近频率上偶然发现的副产品. 后来人们采用大范围的频率扫描(spectral scans)技术，对一些重要的分子源进行扫描，发现了不少U-谱线. 其中有许多至今还没有找到归属. 证认U-谱线，即找寻和确定产生它的分子，是一项需要多学科配合的专门工作. 我们将在本书下册中介绍.

历史上天体物理学曾对物理学作出不少贡献(如氦及电离原子谱线的发现，热核聚变的研究等). 现在，宇宙实验室仍然是一个无法代替的、物理学和化学的天然研究基地.

1.2.3 天体微波激射源(天体脉泽源)

前面(§1.1.2节)提到羟基和水两种天体微波激射源的发现，20世纪70年代又观测到氧化硅(SiO，1974)和甲醇(CH_3OH，1975)的分子源也有异常的辐射特性. 这些异常特性可归结为以下几方面：

(1)小的分子源尺度. 用高角分辨率的射电干涉望远镜判明，这些源的线度一般在$10^{13}\sim10^{16}$cm量级. 最小的“源斑”尺度只有0.1 AU(天文单位).

(2)异常高的谱线强度. 天体微波激射源的谱线辐射强度一般都很高. 例如汤斯等测得的水谱线强度约等效于50 000 K的天线温度. 用自发发射机制很难解释这样的高强度.

(3)谱线的偏振度很高. 有些天体微波激射源发出的谱线甚至是100%的线偏振或圆偏振. 这也不是用自发发射机制能够解释得了的.

(4)同一分子的各条谱线的强度之比往往远离热平衡时的数值. 例如，OH基态的4条频率分别为1 667，1 665，1 720，

1 612 MHz的谱线，在热平衡条件下，其强度之比应该是 9：5：1：1. 但威弗尔等在 W3 射电源中只观测到 1 665 MHz 谱线却观测不到本应比它更强的 1 667 MHz 谱线. 这说明天体微波激射源中的分子系统在能级上的布居不遵从玻耳兹曼分布.

(5)很窄的谱线宽度. 如按通常的热运动致宽理论，这种宽度只相当于几开至几十开的温度.

(6)辐射特性随时间快速变化. 某些天体微波激射源的谱线强度和特征可以在几天至几个月的时间尺度内发生快速的变化. 这个现象不仅反映出激烈的能量交换，同时也从另一个角度表明了源的小尺度特性.

所有这些特性用通常的热平衡条件下的自发发射机制是无法解释的，它会导致一连串自相矛盾或常识上不能接受的结论. 比如，我们能够根据发射谱线的强度和分子源的尺度算出源的亮温，而对于汤斯等所测得的水分子源，亮温竟然达到 10^9K（有些水分子源的亮温甚至高达 10^{15}K). 这与窄的谱线宽度相矛盾. 而且显然，在这个温度下水分子是不可能存在的.

幸好在物理学理论中还知道另外一种谱线发射机制，这就是爱因斯坦早在 1917 年就已提出的受激发射. 而且到 20 世纪 50 年代，汤斯与巴索夫(Н. Г. Басов)、普罗霍罗夫(А. М. Прохоров)已经分别在实验室中实现了氨分子微波谱线的受激发射(maser). 在此基础上，60 年代初制成了各种激光器(laser). 发现天体羟基微波激射源的前一年(1964 年)，汤斯等刚刚因受激发射的研究获得诺贝尔奖. 因此，在那些产生奇异辐射特性的羟基和水分子源带给天文学家一阵惊奇和迷惑之后不久，人们便逐渐想到用受激发射机制来解释它们. 受激发射可以说明谱线的高强度、高偏振度、窄的宽度以及非热平衡的强度比等特征.

产生受激发射的必要条件是某一对能级上的布居反转. 这是一种非热平衡状态，即上能级的分子数超过下能级的分子数. 这

样，问题就归结为，人们必须设想出能在分子云中造成反转的某种抽运模型. 在地球实验室中，布居反转是利用高技术破坏热平衡的结果. 而在稀薄的星云中——尽管人们开始时没有意识到这一点——却是相反，热平衡反而往往好像不是规律而是例外.

受激发射理论取得了成功，它基本上解释了这种奇异的天体辐射并为大多数天文学家所接受*. 由于这些谱线大都分布在厘米波、毫米波或亚毫米波范围，人们便把这些天体称为天体微波激射源，也称天体脉泽(celestial maser). 迄今在恒星形成区和晚型星星周包层中观测到的天体微波激射源已超过 3 000 个，而且已经确认，强的微波激射作用是恒星早期和晚期演化过程中，在新形成的大、中质量恒星和充分演化的主序后星的星周包层中发生的普遍现象. 由于历史原因，前面一种与年轻星成协的被称为星际脉泽，而后一种与晚型星成协的被称为拱星脉泽. 20 世纪 80 年代后又发现了不少新的脉泽分子和脉泽谱线，如 H_2CO、HCN 、NH_3及同位素脉泽 ^{29}SiO、^{30}SiO 和 $H^{13}CN$ 等. 其中谱线最丰富的是 CH_3OH 和 NH_3(CH_3OH 在 834～350 000 MHz 频段内，有近 200

* 可以设想一下，如果天体微波激射源的发现早于地球上的激射器，它会给人们带来何等的困惑？汤斯说(见参考资料[19])，这种可能性是存在的. 倘若当初美国的射电天文学家做得更好些，本来世界上或许在更早以前就已经有了 maser 和 laser. 汤斯认为(从技术上讲)在二战中或战后不久时，射电天文学家是肯定有能力(甚至在 20 世纪 30 年代或许也已经有能力)在天空容易地检测到脉泽的. 但可惜的是，那时没有人(按照当时人们对天文分子的看法也不可能有人)去看一下. 如果那时果真有人看到了天体脉泽，开始时他也许会认为是天外“小绿人”发来的电报. 但汤斯确信，很快便会有人悟出“这是分子态布居反转了，我们得到的是受激发射的放大”. 接着，就会在实验室中去试验这种想法. 于是，微波激射器(maser)和激光器(laser) 就会在天文学的启发下提早在世界上出现. 汤斯用这个例子表达的看法是：科学家和政治家在预言未知的将来时应该谦虚，但我们确实知道，我们所从事的自然科学研究(了解事物，发现新事物)——几乎是任何领域的科学研究——都有机会对社会的未来产生事先难以预料的影响.

条分子谱线，其中 20 多条具有脉泽辐射特性)，预期它们不久将变得与 OH、H_2O 和 SiO 三种“经典”脉泽同样重要. 天体脉泽是天空中亮温最高和尺度最小的非恒星源，因此它成为银河系和近邻星系小尺度研究的最好工具，也是甚长基线干涉(VLBI)观测的自然目标. 利用分子脉泽提供的信息还可以研究脉泽区的物理结构、动力学性质、磁场以及成协天体的演化状态. 特别是在大质量星形成区，脉泽又是恒星形成活动——塌缩、膨胀、喷流和弓形激波等的极好探针.

河外星系中也发现了脉泽辐射. 近 10 多年来脉泽研究中最激动人心的是河外 OH、H_2O 等超脉泽的发现及其深入地观测与研究. 它不仅使我们得以在星系尺度上来探究辐射的相干过程，而且为我们研究星系核中的恒星形成活动、星系乃至宇宙的演化创造了条件. 其中 OH 超脉泽的最主要特征是它的 OH 脉泽光度与相应的远红外光度紧密相关. 因此有人提出可以将 OH 超脉泽的样本看成是强远红外星系的一个子群. 它应该代表活动星系核(AGN)演化的一个非常早期的阶段. 而所有 H_2O 的超脉泽星系也显示出强的核活动，它们通常为 Seyfert 2 星系或 LINERs. 目前在活动星系核方向已发现 50 多个 OH 超脉泽和 20 多个 H_2O 的超脉泽. 在河外 IC4553 检测到的 OH 脉泽强度是银河系最强脉泽源 W3(OH)的 100 万倍. 最强 H_2O 的超脉泽光度则高达6 000 个太阳光度[39]. 由于星系核源的能量很可能来自吸积，并大多数探测到喷流，因此其成协脉泽的观测将提供 AGN 外流和吸积的各种动力学信息.

近 10 年来分子脉泽的高速度、高角分辨率的干涉仪观测揭示，分子和围绕 AGN 黑洞的吸积盘间有着非常紧密的联系. 如：Montgomery 和 Cohen 用 MERLIN 阵观测 Ⅲ Zw 35 星系的 1 667 MHz的 OH 超脉泽，发现其脉泽发射在 40 pc 距离上从南到北有一个约 2.5 $km \cdot s^{-1} \cdot pc^{-1}$的速度梯度，从而推出该 OH 转动

盘内应包含一个 $3\times10^9 m_\odot$ 质量的天体. 这是第一个用宽的 OH 超脉泽谱线来指示星系中心黑洞存在的例子[40]. 对星系 NGC4258 中心 H_2O 超脉泽观测则表明,其脉泽谱由 3 个分量组成,除具有系统速度的中心分量外,其它两个分量分别相对中心位移 700 和 1 000 $km\cdot s^{-1}$. Miyoshi 等人对此进行了高分辨率的 VLBA 观测,发现该星系红、蓝移的超脉泽发射是来自一个尺度非常小(约 0.1 pc)并具有开普勒性质的转动盘,还导出其中心天体的质量高达 $3.6\times10^7 m_\odot$[41]. 这是活动星系核中央存在黑洞的另一个有力证据. 由此可见,利用活动星系核的超脉泽发射可以示踪拱核环(环绕星系核)的运动,并导出中心天体的质量,从而发现更多的现代天体物理极感兴趣的黑洞候选体.

1.2.4 分子外向流——盘系统和分子云中激波区的发现

星际分子的观测使我们能够探知嵌在星云深处的恒星形成区中的许多细节. 在这个区域中,除了天体微波激射源外,20 世纪 70 年代通过分子谱线的观测还发现了伴随着年轻恒星天体(young stellar objects ,YSOs)的分子外向流. 大量的观测表明,在恒星演化的最早阶段几乎所有质量的恒星都将经受一个非常高能的(约 $10^{36}\sim10^{40}$J)质量抛射阶段,也即外向流阶段. 外向流的速度从 10 $km\cdot s^{-1}$ 至 300 $km\cdot s^{-1}$. 年轻天体的外向流活动有来自电离气体的,也有来自中性原子的和分子的. 其中 CO 分子气体的高速双极外向流是更频繁的特征. 这种分子外向流大多明显地由 YSOs 的强星风所驱动. 外向流的其它一些表现形式有:YSOs 附近的光学喷流(电离星风),急速向外移动的 Herbig-Haro 天体;高速的 H_2O 脉泽源;由激波激发的 H_2 发射以及宽翼的热分子的转动发射(如 SiO,CS 以及 CO 等的高转动跃迁)等[42,43]. 由于通常认为恒星形成是分子云核引力塌缩的结果,因此在年轻星诞生时期这种高程度超声的质量外流的发现,的确是一个令人惊讶和意外的事.

存在外向流的迹象最初是从分子谱线的"宽翼"线形发现的. 谱线两翼(频率红移和蓝移的部分)的反常强度表明分子源中可能存在着具有宏观多普勒速度的高速分子. 以后利用 CO、CS 和 NH_3 谱线所做的高分辨率的成图观测,证明了在致密的分子云核中确有高速向外喷射的分子流,而且发现大多数分子外向流具有双极结构.

进一步的细致观测又看到 YSOs 周围,在大致垂直于外向流的方向上,还存在着一个由分子气体及尘埃组成的密度较高并且快速旋转的盘(红外观测也证明了盘的存在[44]). 这样,深埋在分子云中的恒星诞生前和恒星形成早期的演化图像便逐渐在人们面前展示出来. 分子天体物理学使我们第一次直接地看到了一颗恒星诞生时的情景. 图 1.4 是用高分辨率望远镜对一批恒星形成区中原恒星周围进行分子谱线观测后综合得出的示意图[45]. 图中示出了原恒星及其周围的盘和双极分子外向流系统的典型图像. 这是一幅精彩而有说服力的图. 它再一次生动地显示了:天文分子的作用不仅是用它的谱线提供一种强有力的探针,而且它本身就是演化中的主要角色. 人们分析,原恒星的大部分质量是从盘中吸积而来. 同时又通过分子外向流把它周围的大量气体和尘埃迁走,向周围云输送能量和动量. 外向流——盘系统使原恒星既失去质量又得到质量,从而调控了恒星形成的速率,使其与观测相符. 在银河系中目前已探测到近 300 个分子外流源. 这种由正在形成的年轻天体所驱动的质量外流可能是恒星演化最早的可观测的阶段.

与高速气体相联系的是星际物质中的激波现象. 星际激波的研究自 20 世纪 70 年代即已开始. 虽说猎户座分子云(OMC-1)中存在高速气体的证据首先是由 H_2O 脉泽和 CO 热发射的射电谱线观测给出的,但确定激波波前条件的确凿数据则是得自与 CO 观测差不多同时进行的红外谱线以及后来的远红外谱线观测. 当时,对猎户座星云的氢分子 2.12 μm 振转发射谱线的观测[46]表

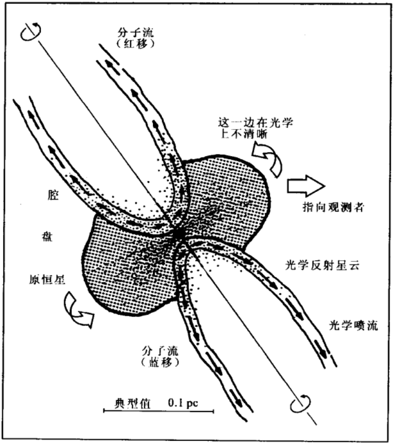


图 1.4 围绕原恒星的盘和流系统的综合示意图

图的中心黑点处为原恒星，图中箭头示出盘和流的运动方向.（取自参考资料[45]）

明，谱线的激发温度达到 2 000 K 左右. 而对同一区域的一些其它分子谱线及远红外的观测却显示出分子云中气体和尘埃的温度只有 100 K～200 K[47]. 关(John Kwan)用激波模型来解释高温的发生[47]，认为 H_2 发射谱线发生在高速气体冲击包围着的云时所产生的激波波前处，并用氢分子的振转辐射作为分子云的冷却机制. 此后的观测和理论研究支持这种解释，而且使人们认识到，星际介质远非处于宁静状态而是受到诸如超新星、星风以及其它的各种

剧烈活动的支配．如对于中性的星际气体，当温度为 10 K 和 100 K 时，声速分别只有大约 0.3 km·s^{-1}和 1 km·s^{-1}．许多星际过程的气体速度远超过这个值．例如，超新星爆发（约1 000 km·s^{-1}）；OB 星的星风（>1 000 km·s^{-1}）；膨胀的电离氢(HII)区（≥10 km·s^{-1}）；原恒星的双极外向流（30～200 km·s^{-1}）；云-云碰撞（约 10 km·s^{-1}）；银河系的旋臂密度波（约 100 km·s^{-1}）．这些事件都可能在星云中产生激波．所以在星际物质中，激波不仅是一种重要现象，也是一种容易发生的常见现象．它在云的动力学演化、发射过程以及解释各种天体现象中扮演重要角色．星际激波的环境主要有两类．一类是弥散云，其密度 $n_H = 0.1 \sim 10^3\ cm^{-3}$，主要由原子气体组成，靠 H、He 和离子原子的光学及紫外发射线冷却．另一类是致密的分子云，它的密度 $n_{H_2} = 10^3 \sim 10^8\ cm^{-3}$，靠原子和分子的光学、红外、亚毫米和毫米波段的谱线冷却．这后者与分子天体物理学的研究有密切关系．

分子云中的激波更多的是在大质量星形成区中被观测到．对大批致密 H Ⅱ 区（它们是新形成的大质量星的一种表现形式）的观测表明，20%的致密 H Ⅱ 区呈彗状结构．它是年轻的大质量星在其母分子云中以超声的速度运动，从而形成弓形激波的结果．在弓形激波前沿的高密气体区可观测到许多 OH 和 CH_3OH 分子的脉泽源斑[48,49]．除 H_2 分子的 2.12 μm 近红外发射外，含 S 分子以及 SiO 分子的热谱线也是示踪分子云中激波的极好探针．

1.2.5　恒星形成过程的主要阶段

恒星形成是天体物理的基本问题之一．它与整个天文学有密切的关系，如：宇宙学、星系和星际介质的结构与动力学演化、地外行星的形成以及生命的起源等．在银河系和星系中恒星的形成是一个极其复杂的过程，是近代天体物理中最有兴趣也是疑难点最多的领域．近 30 年来分子和红外天文的迅速发展使这一领域获得

了前所未有的进展与突破．它也是分子天体物理学诞生以来成就最大的一个领域．其中一个重要的进展就是确立了恒星形成于分子云的基本观点．

从弥漫的星际介质→分子云→致密核→原恒星及盘→恒星及行星涉及差异极大的各种天文环境．利用不同种类的分子、不同的跃迁可以示踪不同物理条件特点，现在已有可能追踪恒星在分子云中形成的详细过程．这就为从理论上研究恒星形成最早阶段的特征提供了有力的实测依据．目前基于观测和理论分析，对低质量星形成过程的理解已比较深入．正如F. Shu所说[50]：孤立的低质量星的形成图景已有条件建立；但成团模式（主要针对大质量星）尚无一般可采纳的描述．这一节我们将主要根据分子和分子谱线提供的信息，对低质量星形成的基本图景以及大质量星形成的一些特征作一简单介绍．

1．低质量星形成的基本图景

已知恒星形成有两种模式，即"松散-聚集"（loosely-aggregated）和"致密-堆积"（closely-paked）两种形式．其中松散-聚集模式允许单个小分子云独立地进行塌缩从而形成单个的星（或双星）．低质量星基本上属于这类情况．即低质量星可以相对孤立地形成．它可以不受附近星存在的影响，同时相对大质量星而言，又很少破坏其诞生的环境．因此低质量星的形成给我们提供了研究恒星形成详细过程的重要实验室．Shu把低量星从分子云中形成的具体过程分解成可区分的4个阶段[51,50]（见图1.5）：

（1）分子云核形成阶段．在分子云包层中，当磁场（或湍动）对分子云的支撑由于双极扩散而消失时首先形成多个缓慢运动的弱磁化的分子云核（图a）．

（2）自相似收缩及原恒星、盘形成阶段．在正在由里向外塌缩的云核里面形成一个被星云盘包围的原恒星（图b）．

（3）磁离心驱动的低电离星风和分子外向流阶段．恒星风从原

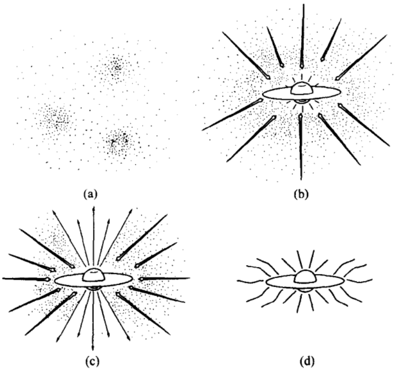


图 1.5　孤立模式下低质量星形成 4 阶段的直观图示

恒星-盘系统的转轴方向喷发出来，产生一个光学喷流和双极外向流，在盘面方向则继续在吸积物质(图 c).

(4)尘埃盘围绕的主序前(PMS)星演化阶段. 物质下落全部终止，具有一个拱星盘的新生星(实际是 PMS 星)终于显露出来(图 d).

第 4 阶段的进一步演化将涉及星云盘的最后消散. 此时，一部分物质可能结合到行星或恒星的子星中去或者由于高能的外向流而播散.

2. 大质量星形成的基本特征

较强的紫外辐射对其环境的破坏，以及大质量星成团形成模式，使大质量星形成的研究变得复杂. 目前对大质量星的诞生和最早阶段的了解是贫乏的. 由于大质量星的演化时标短，以致它几乎

没有一个明确的主序前星阶段．其形成过程也没有像低质量星那么多的容易区分或利于观测的阶段．

在忽略转动、磁场和成团性等引起的效应时，大质量星的形成过程大致有以下几个特征[48,49]：

(1)等温塌缩阶段：物质以 $r^{-0.5}$ 的速度等温地向稳定中心塌缩，形成一个小的致密核．r 为物质至中心的距离．

(2)吸积核阶段．中心稠密核温度升高、压力增大、塌缩停止，进入吸积、下落阶段，而外包层继续等温塌缩．

(3)超致密 HⅡ 区阶段．中心核最后停止吸积进入主序，形成一个被星风吹开的致密 HⅡ 区，周围仍被一个暖的分子包层所包围．有外向流、激波和脉泽活动等与之成协．

由以上介绍可知，无论是低质量星还是大质量星，分子云的塌缩都是恒星形成的第一步．因此在观测上寻找分子云塌缩（或下落）的证据引起了广泛的兴趣．然而，由于塌缩区域小，时标短，较直接的证据是难以找到的．1992 年 Zhou 完成了有关的辐射转移计算，建立了更普遍的分子云自里向外塌缩的谱线轮廓特征，成功地解释了在 B335 中观测到的 H_2CO 和 CS 谱线红、蓝不对称的塌缩特征[52,53]．利用高分辨率的 CS，HCO^+ 和 H_2CO 等转动谱线已在不少低质量恒星形成区观测到了分子云的塌缩或下落的运动[54]．结合分子云转动的观测，这些研究将揭示，在恒星形成中到底有多少物质从下落转移到绕星盘中[55]．近年来在大质量恒星形成区的致密核中也寻找到了不少下落的证据[49]，它是目前该领域的一个研究热点．

1.2.6 拱星包层的分子发射和恒星演化晚期阶段

这里介绍的恒星演化晚期阶段指的是渐近巨星分支（AGB 星）至行星状星云（PN）的演化阶段．20 多年来红外和分子天文的迅速发展，使人们对恒星演化晚期阶段的认识发生了很大的改观

(见参考资料[28,56～58]).

1.2.1节中曾提到在已发现和证认的120多种天文分子中有65种已在不同演化阶段的晚期演化星包层中探测到了,我们称其为拱星分子. 其中54种分子是在射电波段上观测到的(见表1.2). 目前仅用红外手段探测的分子有8种,它们是:H_2,C_3,C_2H_2,C_5,CH_4,SiH_4,C_2H_4和SH. 在光学波段也有明确观测到的分子,如C_2,CN和CH^+等[59,60](结合表1.1). 大多数的拱星分子产生于拱星包层的各种各样的化学过程中. 拱星包层的化学依赖于气体的化学组成,在晚型星中主要看它们的碳氧比,即C/O>1还是<1. C/O>1者为富碳的AGB星,反之为富氧的AGB星. 大多数拱星分子(约50多种)是在富碳的AGB星中探测到的. 如各种类型的含碳分子:$HC_{2n+1}N$ (cyanopolyyne chains),$n=1\sim4$、C_nH (hydrocarbon chain radicals),$n=2\sim8$、其它有关的碳链分子C_2S,C_3S,C_4Si,H_2C_3,H_2C_4以及各种含卤族元素和硅元素的化合物[61]. 发现分子最多的富碳AGB星是IRC+10216,大约25种拱星分子只在这颗星的包层中被探测到.

与星际分子云相比,晚期演化星的拱星包层有相对简单的运动学结构(参看1.2.1节). 因此一般情况下,根据单天线观测得到的谱线轮廓就可大致了解所测分子的空间分布(见第三章). 近些年来不断增加的干涉仪成图测量更提供了拱星分子空间分布的细节和运动学. 拱星分子的观测和模型已有效地用来研究恒星从AGB到行星状星云的演化. 此外,在富碳的拱星包层中,用不同分子谱线间的强度比还可以较好地区分出处于不同演化阶段中的晚期演化星[60].

在拱星分子中还有3种是熟知的脉泽分子,即H_2O,SiO和OH. 它们存在于富氧的拱星包层中. 利用红外天文卫星(IRAS)的"色指数"判据,观测到的脉泽源数大幅度地增加. 如证认有OH-1612 MHz脉泽发射的OH/IR星已超过1 500个. 脉泽发射与

AGB 星的质量损失现象紧密有关，它也是确定拱星包层气体密度、温度以及速度场的灵敏手段. 大量观测表明，SiO 脉泽处于最靠近恒星光球的区域，H_2O 脉泽处在大约 10 个恒星半径处，而 OH 脉泽则位于更远的大约几百个恒星半径的地方[62]. 1987 年在 CIT 6 中发现和证认的 HCN $J=1-0$ 脉泽则是第一个在富碳 AGB 星包层中找到的脉泽. 近年来又发现几乎所有具有富氧包层的 AGB 星都发射 SiO 脉泽，因此 SiO 脉泽成为富氧 AGB 星的最佳指示器. 而 HCN 脉泽则是富碳星的可靠探针.

AGB 星阶段的一个重要特征是具有可观的质量流失率(每年抛射的质量是 $10^{-8}\sim10^{-4}m_{\odot}$). 研究表明，AGB 星的质量流失是确定 AGB 星演化寿命的惟一手段. 更有甚之，当恒星离开 AGB 阶段后，它仍惊人地影响着 AGB 星以后的性质. 许多分子谱线特别是 CO 谱线和 OH 脉泽已被广泛用来确定这一质量流失率和追踪恒星沿 AGB 至 PN 的演化. 近 20 年来该领域研究的一个重要成果正是揭示了 AGB 星与其演化后代——行星状星云间的紧密联系. 1975 年人们在年轻的 PN-NGC7027 包层中发现了 CO 分子，1979 年又在年轻 PN-Vy2-2 中探测到 OH 脉泽，从而第一次证实了行星状星云中中性物质的存在. 今天至少在 50 多个 PN，30 多个原行星状星云(PPN)中观测到了 CO 和 OH 分子. 由激波激发的 H_2 谱线也在 PN 中观测到了. 这些分子的观测为探讨恒星从 AGB 到 PN 的演化规律，研究 PN 电离星风与 AGB 中性包层遗迹慢风间的相互作用提供了丰富的资料[62~64].

20 多年来，该领域的另一个重要成果是利用拱星分子谱线(包括脉泽)确定恒星演化晚期阶段中各类天体的拱星结构和运动学，发现了许多新的重要的事实. 如：利用干涉阵测量了个别晚型星 OH 发射环的自行与演化；对 SiO 脉泽的 VLBI 和偏振的测量发现 SiO 脉泽起源于具有不同径向速度、磁场和尺度(约 0.1～0.6 AU)的小单元；在一些晚期演化星中利用 CO 或 OH，H_2O 脉

泽的观测发现了高速的双极外向流；近几年来对一些 PPN 和 PN 中的分子发射的成图观测则表明，在 PPN 和 PN 阶段拱星包层的轴对称结构更具支配地位，同时在极轴方向有高速的外向流.

至此，我们已就最主要方面介绍了天文分子谱线提供的各种宇宙信息以及分子天体物理学发展的主要成就. 它深刻地揭示了天文分子的研究已经渗透到天体物理的各个领域. 下一节我们将就分子天体物理学与其它学科的关系进行探讨.

§1.3 作为交叉学科的分子天体物理学

与其它学科一样，天文学在其发展过程中一直是同许多邻近的学科相互渗透，相互推动着前进的.

自古以来，数学、力学、光学就和天文研究有密切的联系. 其辉煌的范例是行星运动的精密观测最终导致哥白尼提出日心说和牛顿发现万有引力定律. 牛顿通过力学和天文学的结合创立了天体力学，而天体力学的发展又有力地推动了数学、物理学的进步.

19 世纪的科学家把光谱研究和天文望远镜观测结合到一起，1814 年夫朗禾费观测到了太阳和恒星的暗线. 到 1860 年左右，基尔霍夫和本生证认出它们是地球上已知元素的吸收谱线. 这个发现标志着现代天文学的起点，从此一门影响深远的学科——天体物理学出现在世人面前. 一个多世纪以来，它的蓬勃发展与量子理论、相对论、原子物理学、核物理学及粒子物理学等学科的进展紧密相联. 地球上的实验室研究和理论研究为天体物理学奠定了理论基础. 反过来，以宇宙实验室为对象的天文观测也不断地用它的新发现丰富着科学的宝库并有力地激励相邻科学的发展. 可以举出的重大事例如：在天体物理学的幼年，氢原子谱线系和氦离子毕克林谱线系的天文观测为玻尔创立原子光谱的量子理论作出的重大贡献；爱因斯坦 1915 年提出广义相对论后，天文观测为它作出

的决定性检验(水星近日点进动、光线在太阳引力场中的弯曲、脉冲星的引力波阻尼);还有核聚变的理论预测在解释主序星的产能机制上的巨大成功;粒子物理学在宇宙学中的作用以及辐射的量子跃迁理论在恒星大气理论中的作用等等都是人们所熟知的.

20世纪中叶以来,随着现代科学技术的发展,学科之间交互影响和相互渗透的趋势愈来愈显著. 在分子天体物理学的建立和发展过程中表现得非常突出.可以说,学科之间的相互推动和协同动作是人们能够在短短几十年中开拓出这样一门成果卓著、富有生命力的新学科的决定性因素之一. 从大的方面说它主要表现在物理学和化学的基础研究,射电天文学和空间天文学的最新技术成就与天文研究(包括分子天体物理学和分子天体化学)间的相互推动.

天文学研究的基础是观测——尤其是谱线观测. 20世纪30年代得到的第一批天文分子光学谱线是用当时最先进的光学望远镜检测得到的. 最初的分子谱线射电观测是建立在二次大战后发展起来的射电天文观测技术,特别是中性氢21 cm谱线观测的基础之上的,而高灵敏度的自相关谱线接收机的研制成功在最终发现OH谱线的曲折道路上迈出了决定性的一步. 反过来,60年代几种星际分子射电谱线的接连发现对天文界的冲击以及分子天体物理学对谱线观测的苛刻要求又极其有力地激发了天文观测技术的进展. 40年来,这种进展主要表现在两大方面,一是谱线观测几乎扩展到所有波段,二是观测精度大大提高.技术的每一个进步都带来前所未有的天文发现. 我们知道,70年代和80年代发现的大部分星际分子分别是由美国NRAO的11 m毫米波望远镜和日本野边山的45 m毫米波望远镜观测到的;1970年第一个氢分子谱线的检测是利用空间天文技术(火箭)得到的;恒星形成区的细致情节是由甚长基线干涉观测得到的.当前的明显趋势是:分子天体物理学越来越深入的研究要求射电及红外天文技术提供更高的灵

敏度、更高的空间分辨率、更高的频率(亚毫米波、远红外)和更高的频率分辨率,以及为了提高数据采集率发展更高水平的多重检测手段. 还有某些重要波段(如 500 GHz 的 H_2O,O_2 的谱线)由于地面望远镜无法观测,推动了空间天文(包括机载望远镜、同温层观测和火箭、卫星望远镜)的发展.

从物理学方面说,光学、红外波段的分子光谱学和微波、射电波段的分子波谱学是孕育分子天体物理学的最基本的母科学. 最早的天文分子是通过光学谱线观测发现的,而 20 世纪 60 年代以后发现的大多数天文分子主要是通过射电和红外谱线观测到的,如果没有 40 到 50 年代实验室微波波谱学所积累的大量知识,搜寻和证认这些分子是无法想象的. 有意思的是,最著名的分子光谱学家 G. Herzberg 和最著名的微波波谱学家 C. Townes 都很早就意识到天文分子的重要性并在分子天文学的先驱研究中发挥过重大的作用.

在天文原子光谱的研究历史上,除毕克林线系外,还曾有 1868 年检测到日珥中的氦原子谱线,1864 年检测到星云中的氧离子谱线,当时都是地球上不曾见过的未知谱线. 在天文分子光谱的观测中发现了更大量的地球上从未见过的 U-谱线,推动了分子光谱的基本研究. U-谱线一般起源于各种地球上不曾见过的地外"奇异分子". 人们在找到用实验室办法"制造"这些分子(包括离子分子和基)的方法并测出它们的谱线之前(这两者往往都是很不容易的),只能依靠常识和经验去推测谱线可能归属于哪种假想的分子,然后根据假想分子的结构用理论计算出能级和谱线以进行比较. 量子化学理论计算在计算和预测分子能级特性及谱线静止频率以证认 U-谱线方面起着至关重要的作用. 另外在研究各种地球上不易实现的化学反应的反应参数时,量子化学理论计算也是重要的工具. 天文研究对计算精度的要求,推动了量子化学计算方法的进步. 20 世纪 70 年代以来,以超级计算机为技术基础,发展并

改善了从头计算法,编制了各种版本的计算软件.现今已成为观测和证认地外"奇异分子"以及天体化学研究工作中不可缺少的一个部门.

但量子化学计算不能代替用真正样品在实验室中对U-谱线作出最终证认并测出静止频率的精确值.天文上这种强烈需求推动了光谱学及波谱学的进步.突出的例子是,为了证认不稳定的离子和基,发展了一种新的波谱仪——反应式分子波谱仪.它已经成为证认地外分子的一种决定性的仪器.

天文观测不仅有时先于实验室发现新的分子或分子的新谱线,而且有时还能够测到比实验室数据更精确的谱线常数.像CH的分子常数和HNC的四极矩耦合常数(eQq)[65]等都是首先从天文观测数据得出的.

分子天体物理学借助分子谱线为探针研究分子源的物理状况,需要应用有关源的状况的物理知识.天文分子处于多种多样的复杂天文环境中,它们受到宇宙中各种粒子的碰撞或电磁波的照射,或者受到星际激波的扰动,还可能由于辐射或碰撞而电离.另外,分子云中存在着复杂、剧烈的动力学过程如恒星演化早期分子云的引力坍缩和分子外向流以及恒星演化晚期物质向外抛射.这就要用到辐射、电离、等离子体物理和气体动力学的有关知识.一些极端的天文环境条件如超低密度、超低温度等是地球实验室至今尚难以完全模拟的,这自然也促进了相应的实验和理论研究.

分子天体物理学研究使人们认识到化学与天文学、物理学之间的极其深刻的相互联系和相互渗透.发展到目前阶段,人们的观点和几十年前(例如在§1.1.1节中曾经提到的A. S. Eddington的看法)相比已经有了质的变化.这种变化可以引用Dalgarno的一句精辟的话来表述:"化学是如此地渗透到天文现象中,以至于在一篇关于天文环境的化学的评述与一篇关于天文学的评述之间,区别将只有强调的重点不同——至少从复合时代以来是如

此".

确实,在这个领域中,天文过程、物理过程和化学过程结合得如此紧密,以至于在实际研究中有时很难严格区分究竟是物理问题,是天文问题,还是化学问题. 关于这一点可以用星际物质中一个最简单的两体过程为例来说明.

过程的第一步是氢原子与电子通过辐射光子释放能量而结合成负氢离子

$$H + e \rightarrow H^- + h\nu$$ (称为辐射附着)

继以第二步负氢离子与氢结合同时放出电子而形成中性氢分子

$$H + H^- \rightarrow H_2 + e$$ (称为缔合脱离)

在早期(大爆炸后的复合时代)宇宙的化学演化中这是一个颇为重要的天文过程,是当时形成氢分子的两种途径之一*. 另一方面,它又是一个典型的气相化学过程(氢原子化合为氢分子,电子起着催化剂的作用). 同时,这两步中的每一步又都是一个物理上的两体碰撞过程,我们必须考虑过程中的碰撞截面及能量守恒、动量守恒和角动量守恒.

这只是一个最简单的例子,以后将看到,在诸如星云化学、云的演化、云的加热和冷却等的一系列问题中,物理、化学、天文学往往都是交叉在一起的,三者构成同一问题的不同侧面,形成一幅错综缠绕的图像. 事实上,在分子天体物理学的实际工作中,有时已很难说清究竟是天文学家在推动着"地球上的"物理学和化学的实验和理论研究(如 U-谱线的证认,反应速率的确定以至碳 60 的发现),还是化学家在指引着天文观测的搜寻目标(如一些奇异的地外分子或不稳定离子分子的寻找).

---

* 现有的气相氢分子的形成的主要途径是,氢原子在尘粒表面复合后,"蒸发"到宇宙空间. 但这是在星际物质中出现恒星死亡时喷发的尘粒之后的事.

20世纪60年代前的很长一段时间中，化学这个侧面的重要性没有被人们充分认识.天体物理研究中较少考虑化学反应过程.品种众多的天文分子发现后要求人们解释它们在苛刻的星云环境中能够大量化合并长期存在的原因和化学演化的历程，这就迫使人们去研究天文环境中各种可能的分子形成和破坏的基本化学、物理机制.

对星云的化学过程进行探讨后发现，无论气相反应或固态表面反应都相当复杂. 其中许多机制是化学家过去不熟悉的. 原有的、从地球实验室得出的化学知识对天文学研究显得远远不够.不少超低温、极低密度下的两体化学过程是地球条件下罕见甚至难以实现的.星云化学的理论研究中，人们需要设想出星云条件下种种可能的分子形成及破坏过程.更长远的目标是，在综合分析的基础上提出星云中错综交杂的化学反应网络模型，并期望能通过大规模的计算，模拟出星云的化学演化，最终得出物理、化学条件不同的星云在演化的不同阶段中每种天文分子的理论丰度以与天文观测比较.

这些研究需要精确知道在极低温度、极低密度这类天文条件下有关的化学反应参数，诸如分子的光解离速率、自由基或不稳定分子的气相反应速率系数以及具有活化能势垒的离子-分子反应时反应截面的值等等. 它向量子化学、物理化学、分子束化学反应动力学提出了一大堆理论和实验的课题. 推动了有关的理论和实验工作.近年来已经用了多种化学反应动力学的手段，对星际物质中最容易发生的所谓放热的离子-分子反应进行从室温直到2 K低温的实验研究，测量其反应参数. 其中包括低温喷嘴技术、选定离子流动管方法、低压离子阱方法(如离子回旋共振、潘宁阱、导束射频阱)等各种近年来新发展的方法.

星际条件下还有一种离子-分子辐射缔合过程，它的速率系数的值遍及10个量级范围. 一般随温度的减少、反应物的增大及生

成物键能的增加而增大. 室温下反应往往太慢以致很难用通常的技术测量. 20 世纪 90 年代以来已经开始用一些离子阱实验去测量离子-分子辐射缔合的速率系数,有些极端灵敏的实验可以达到 $10^{-14}\ cm^3 \cdot s^{-1}$以下.

从天文观测可以得到地球实验室无法提供的化学知识. 例如,超新星 1987A 就是一个百年不遇的宇宙化学实验室,通过对它的化学成分演化的连续监测可以检验现有的星际化学理论. 例如,人们已经发现原先对于 CO 的产生机制的看法不足以解释观测到的实际丰度.

在本节的最后,我们还必须提到碳 60,它是富勒烯(buckminster fullerene)的一种,俗称足球碳或巴基球[30,31]. 当谈到天文对化学、物理学的推动时,如果忘记介绍碳 60 的发现,会是一个令人遗憾的疏漏. 碳 60 是碳的第三种同素异构体,分子结构相当于把 60 个碳原子放到足球的每一个五边形和六边形的角上,形成一个化学上很稳定的笼子状结构. 由于它在科学上的深远意义——不仅在化学、物理学上是极重要的突破,而且在材料科学上(如超导材料、纳米材料)也因为富勒烯家族的一系列令人瞩目的特性,使原子团簇的研究进入一个新阶段——它的主要发现者 H. W. Kroto 被授予 1996 年度诺贝尔化学奖.

很早就对碳链分子感兴趣的 Kroto 在 1974 年用微波波谱仪测量了他的小组制备的 HC_5N 样品的谱线频率. 那时,已经在星云中检测到 HC_3N,Kroto 便申请用射电望远镜寻找天文 HC_5N. 1975 年他按照测定的频率在人马座 B2 中顺利地找到它的谱线. 接着他猜想或许天上还有 HC_7N 分子,于是又设计在实验室中制备出样品并测量出谱线频率. 果然,1977 年在金牛座一个暗星云中找到了这种具有长碳链分子的弱谱线. 显然,下一个候选者应该是碳链更长的 HC_9N. 由于合成 HC_9N 是一项令人望而却步的工作,因此他的小组用外推的办法计算出频率的理论值,出乎意料地

是竟然不久便顺利地在星云中检测到了 HC_9N.

众多的长碳链天文分子激发了 Kroto 的强烈兴趣，Kroto 希望探索这些长链分子为什么在星际介质中出现，它们的源在何处.到了 80 年代初，他逐渐认定，通常的离子-分子反应不能解释碳链分子的起源. 而富碳的红巨星 IRC＋10216 喷发出大量尘粒和碳链的事实似乎暗示着它可能涉及某种尘粒和碳链共生的化学. 1985 年，他想到用激光气化石墨靶产生碳原子团簇的实验来模拟碳星大气的化学过程并产生长碳链分子. 这个实验证实了红巨星中的化学过程可能是星际碳链产生的原因. 也正是在这个实验中，他的小组作出了导致后来获得诺贝尔奖的发现. 质谱分析显示出，在汽化的等离子体中能自发地形成稳定的纯碳原子团簇 C_{60}. 当时研究碳原子团簇的不止一家，Kroto 成功的关键，或者说他的贡献，在于他的 5 人小组经过几天认真的苦苦思索想到了封闭的鸡笼式分子模型，Kroto 甚至联想到 Buckminster Fuller 设计的圆顶建筑. 接着，在一夜之间几个人同时想到它是若干五边形和六边形构成的足球型的多面体. 以后，为了证实这个推测，又锲而不舍地用了 5 年的时间去制备足够的样品. 最终用说服力极强的核磁共振化学位移谱方法对纯碳 13 同位素做成的足球碳的笼状结构作成了判决性的结论.

这是一个由分子天文研究触发的戏剧性的结局. 正像 Kroto 在 1992 年所说的，所有这一切——一个激动人心的、化学和材料科学(现在看来似乎还应该加上物理学和天文学，作者注)上具有战略重要性的新领域的发现——全部都是被科学家对“碳链在宇宙空间及恒星中的起源以及它所扮演的角色”这个基础问题着魔般的迷恋激发起来的.

从更广的角度看，分子天体物理学还和宇宙起源以及生命起源这些自然科学基本问题有密切的联系. 自大爆炸后的复合时代产生宇宙中第一个分子起，分子就在星云和恒星的演化中扮演着

重要角色．我们也介绍过，作为大爆炸残余辐射的微波背景辐射的第一个观测证据就是由 CN 分子谱线观测给出的．

对于生命起源问题，我们可以说，任何一种宇宙生命起源学说都不能不以星际有机分子大量存在这个基本事实作为前提．1969 年曾在坠落于澳大利亚墨奇森的一个陨石中找到过非地球起源的氨基酸．天文学家当然希望能在分子云中也发现类似的“生命前物质”．1978 年即已在实验室中测定了氨基酸的微波谱线，并在此基础上，用过多座高水平的射电望远镜在各类分子云中广泛搜索．自那时起，在星云中搜寻氨基酸的努力一直没有间断过，至今仍是分子天体物理学中的前沿课题．事实上，在人马座 B2 中已经检测到其静止频率与实验室得到的甘氨酸（NH_2CH_2COOH）频率匹配的谱线，它有可能就是来自星云中的甘氨酸[66]．1996 年 Snyder 等也已经用干涉仪天线阵在人马座 B2(LMH)源中检测到 CH_3COOH（醋酸）[67]．它的重要意义在于它能够和 NH_2^+ 通过两体合成而构成最简单的氨基酸——甘氨酸．由于人马座 B2 星云与形成太阳系的原始星云非常相似，人们猜测 45 亿年前形成太阳系的星云中也可能存在氨分子和醋酸分子，并发生反应而生成氨基酸．今后任何天文氨基酸方面的发现无疑将会为宇宙中原始生命的早期演化提供基本的信息．它的深远意义是可以预想得到的．

分子天体物理学作为交叉学科所具有的特点，使研究者不得不同时涉猎多种学科，并且经常要从不同的学科角度进行探讨．它也告诉我们，为什么多学科的协同研究常常是高效率的和必要的．充分认识这个特点，无论在学习这门科学还是在进行有关的科学研究时，都是非常重要的．

参 考 资 料

[1] Barnard E E. ApJ, 1919, 49: 1.

[2] Eddington A S. Proc Roy Soc A, 1926, 111: 424.
[3] van Dishoeck E F. Photodissociation and Excitation of Interstellar Molecules(Thesis). The Netherlands: University of Leiden, 1984.
[4] Herzberg G. Molecular Spectra and Molecular Structure I. Spectra of Diatomic Molecules. New York: van Nostrand Reinhold, 1953.
[5] Merrill P W. Publ Astron Soc Pac, 1934, 46: 206.
[6] Russell H N. MARAS, 1935, 139: 840.
[7] Dumham T, Adams W S. Observatory, 1937, 60: 99.
[8] Swings P, Rosenfeld L. ApJ, 1937, 86: 483.
[9] Douglas A E, Herzberg G. ApJ, 1941, 94: 381; Herzberg G. Some Historical Remarks. In: Winnewisser S G, Armstrong J T, ed. Lecture Notes in Physics 331 — mm and Sub-mm Observations in Astrophysics. Berlin: Springer, 1988. 1
[10] McKellar A. Publ Astron Soc Pac, 1940, 52: 187; 312.
[11] Adams W S. ApJ, 1941, 93: 11.
[12] McKellar A. Publ Dom Astr Obs, 1941, 7: 251.
[13] Diercksen G H F, Huebner W F, Langhoff P W. (eds.) MOLECULAR ASTROPHYSICS—State of the Art and Future Directions. Dordrecht: Reidel Publishing Company, 1985.
[14] Bates D R, Spitzer L. ApJ, 1951, 113: 441.
[15] Shklovskii I S. Astron Zhurnal, 1949, XXVI: 10; Astron Zhurnal, 1952, XXIX: 144.
[16] Townes C H. a. Washington Conference on Radio Astronomy—1954: Journal of Geophysical Research, 1954, 59(1): 198; b. In van de Hulst H C, ed. RADIO ASTRONOMY, IAU Symposium4. Cambridge: Cambridge University, 1957. 92.
[17] Barrett A H, Lilley A E. A Search for the Atmospheric and Cosmic Microwave Spectrum of OH; Naval Research Laboratory. (NRL Report 4809), Washington D C, 1956; Barrett A H, Lilley A E. Astron J, 1957, 4: 5.
[18] Ehrenstein G, Townes C H, Stevenson M J. Phy Rev Lett, 1959, 3:

40.
[19] Clegg W C, Nedoluha G E. (eds.) Astrophysical Masers. Berlin: Springer, 1993.
[20] Weinreb S, Barrett A H, Meeks M L, et al. Nature, 1963, 200: 829.
[21] Bolton J G, van Damme K J, Gardner F F, et al. Nature, 1964, 201: 179; Bolton J G, Gardner F F, McGee R X, et al. Nature, 1964, 204: 30.
[22] Barrett J G, Rogers A E E. Nature, 1964, 204: 62.
[23] Weaver H, Williams D R W, Dieter N H, et al. Nature, 1965, 208: 29.
[24] Cheung A C, Rank D M, Townes C H, et al. a. Phys Rev Lett, 1968, 21: 1701;b. Nature, 1969, 221: 626.
[25] a. Snyder L E, Buhl D. ApJ, 1969, 155: L65; b. Snyder L E, Buhl D, Zuckerman B, et al. Phys Rev Lett, 1969, 22: 679.
[26] a. Langer W D, van Dishoeck E F, Bergin, E A, et al. In: Mannings V, Boss A P, Russell S S, ed. Protostars and planets Ⅳ. Tucson: The Universityn of Arizona, 2000. 29; b. Hollis J M, Lovas F J, Jewell P R. ApJ,2000, 540: L107; c. Hollis J M, Lovas F J, Jewell P R, et al. ApJ,2002, 571: L59.
[27] Verchuur G L, Sky and Telescope, 1992, 379.
[28] van Dishoeck E F. (ed.) Molecules in Astrophysics: Probers and Processes(IAU Symposium No. 178). Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1997.
[29] Combes F, Pineau des Forets G. (ed.) Molecular Hydrogen in space. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
[30] Kroto H W. Angewandte Chemie (Internation Edition in English), 1992, 31: 111.
[31] Kroto H W, Allaf A W, Balm S P. Chem Rev, 1991, 91: 1213.
[32] Millar T J, In: van Dishoeck E F, ed. Molecules in Astrophysics: Probers and Processes (IAU Symposium No. 178). Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1997. 75.

[33] Wall W F. In: Wall W F, Carraminana A, Carrasco L, ed. Millimeter-Wave Astronomy: Molecular Chemistry & Physics in Space, Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1999. 1.
[34] Brown R L, Vanden Bout P A. Astron J, 1992, 102: 1956.
[35] Ohta K, Yamada T, Nakanishi K, et al. Nature, 1996, 382: 426.
[36] Omont A, Petitjean P, Guilloteau S, et al. Nature, 1996, 382: 428.
[37] Booth R S, Aalto S. In: Hartquist T W, Williams D A, ed. The molecular astrophysics of stars and galaxies. Oxford: Clarendon Press, 1998. 437.
[38] Cernicharo J, Gottlieb C A, Guelin M, et al. ApJ, 1989, 341: L25; Bernath P F, Rogers S A, O'Brien L C, et al. Phy Rev Letters, 1988, 60: 197.
[39] Koeckmoer A M, Henkel C, Greenhill L J, et al. Nature, 1995, 378: 697.
[40] Montgomery A S, Cohen R J. MNRAS, 1992, 254: 23.
[41] Miyoshi M, Moran J M, Herrnstein J, et al. Nature, 1995, 373: 127.
[42] Lada C J. Ann Rev Astron Astrophys, 1985, 23: 267.
[43] Bachiller R. In: van Dishoeck E F, ed. Molecules in Astrophysics: Probers and Processes (IAU Symposium No. 178). Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1997. 103.
[44] Strom S E, Strom K M. In Permbert M, Jugaku J, ed. IAU Symp. No. 115: Star Formation Regions. Dordrecht: Reidel, 1987. 255.
[45] Kaifu N. In: Permbert M, Jugaku J, ed. Star Forming Regions. Dordrecht: Reidel, 1987. 275.
[46] Gautier T N, Richard U F, Treffers R, et al. ApJ, 1976, 207: L129.
[47] Kwan J. ApJ, 1977, 216: 713.
[48] Churchwell E. In: Lada C J, Kylafis N D, ed. The Physics of Star Formation and Early Stellar Evolution, Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1991. 221.
[49] Garay G, Lizano S. PASP, 1999. 111: 1049.

[50] Shu F H. In: van Dishoeck E F, ed. Molecules in Astrophysics: Probers and Processes (IAU Symposium No. 178). Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1997. 19.

[51] Shu F H, Adams F C, Lizano S. Ann Rev A&A, 1987, 25: 23.

[52] Zhou S. ApJ, 1992, 394: 204.

[53] Zhou S. ApJ. 1992, 404: 232.

[54] Hartquist T W, Caseili P, Rawlings D P, et al. In: Hartquist T W, Williams D A, ed. The molecular astrophysics of stars and galaxies. Oxford: Clarendon Press, 1998. 101.

[55] Evans II N J. Ann Rev A&A, 1999, 37: 311.

[56] Hartquist T W. (ed.) Molecular Astrophysics: a Volume honouring Alexander Dalgarno. Cambridge: Cambridge University Press, 1990.

[57] Hartquist T W, Williams D A, ed. The molecular astrophysics of stars and galaxies. Oxford: Clarendon Press, 1998.

[58] Kwok S. The origin and evolution of planetary nebulae, Cambridge: Cambridge University Press, 2000.

[59] Bakker E J, van Dishoeck E F, Waters L B F M, et al. A&A, 1997, 323: 469.

[60] Olofsson H. In: van Dishoeck E F, ed. Molecules in Astrophysics: Probers and Processes (IAU Symposium No. 178). Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1997. 457.

[61] Millar T J. In: Hartquist T W, Williams D A, ed. The molecular astrophysics of stars and galaxies. Oxford: Clarendon Press, 1998. 331.

[62] Field D. In: Hartquist T W, Williams D A, ed. The molecular astrophysics of stars and galaxies. Oxford: Clarendon Press, 1998. 313.

[63] Kwok S. Ann Rev Astron Astrophys, 1993, 31: 63.

[64] Howe D A, Williams D A. In: Hartquist T W, Williams D A, ed. The molecular astrophysics of stars and galaxies. Oxford: Clarendon Press, 1998. 347.

[65] Snyder L E, Hollis J M, Buhl D. ApJ, 1977, 215: L87.
[66] Miao Y, et al. BAAS, 1995, 26: 906.
[67] Mehringer D M, David M, Snyder L E, et al. ApJ, 1997, 480: L71.
[68] 李守中. 一个了解宇宙的新窗口. 现代物理知识, 1991, No.4:22; No.5:17; No.6:9; 1992, No.1:31; No.2:14.
[69] 孙锦. 分子天文学和恒星形成. 见: 李启炳,李宗伟,汲培文. 九十年代天体物理学. 北京:高等教育出版社, 1995, 330~401.
[70] 李守中,孙锦. 分子天文学的发展与展望. 北京大学学报(自然科学版),1996,32(5):663~678.

第二章　天文分子谱线的物理基础

§2.1　分子能级和谱线概述

天文观测直接得到的是星际分子的谱线．由于分子系统的复杂性，内部的各种相互作用使谱线呈现多种类型，其中落在厘米、毫米和亚毫米波段的几种类型对于分子天体物理学家来讲是特别有兴趣的，它们是：

1. 转动能级(H_2O，CO，SiO)
2. Λ 双重能级(OH，CH)
3. K 双重能级(H_2CO，H_2CS)
4. 反演能级(NH_3)

括号中举出具有这种能级的分子的实例．

如果分子中的某些原子具有不为零的核自旋 $\boldsymbol{I}_N$，则上述能级中还含有自旋造成的超精细结构．

分子光谱学在实验和理论方面都已有相当成熟和系统的研究工作，特别是射电波段波谱学的理论和实验研究已经提供了相当详尽的各种分子微波谱线的频率表，可以帮助天文谱线的认证工作．但天体物理研究远不是仅限于简单的查对．我们需要了解各种能级的物理特性，因为这些特性对天体物理过程有基本的影响．另外，目前还有不少天文谱线(如复杂分子的谱线、离子分子的谱线、以及处于激发态的分子的微波跃迁所产生的谱线等)还缺乏实验室数据．这些问题都需要对分子能级理论有基本的了解．本章将介绍分子能级和谱线的基本知识，以天文上感兴趣的能级和谱

线为重点．进一步的知识可在本章的参考资料中找到．

为了对分子能级的总体情况有一个粗略的了解，下面先概略地谈一谈分子的能级情况．分子能级远比原子能级复杂．我们知道，原子的总能量由下列各部分组成：首先是核外电子的能量——包括各个电子的动能以及电子与核之间及各个电子之间的相互作用势能（这些是主要的）；然后是电子自旋磁矩和轨道磁矩间的相互作用造成的能级精细结构；最后还有原子核磁矩和电四极矩造成的能级超精细结构．

分子能级的复杂性不仅是由于电子不再是在单个核所产生的有心力场中，而是在若干个原子核所产生的总的库仑力场中运动，从而大大地增加了计算的困难；而且还由于各个核之间可以产生振动，整个分子还可以绕其质心转动，使能级构造更加复杂．

分子总能量主要由以下几部分组成：

(1)各个电子的动能 T_e，

(2)各个电子之间的库仑势能 V_{ee}，

(3)各个电子与各个核之间的库仑势能 V_{Ne}，

(4)各个核之间的库仑势能 V_{NN}，

(5)各个核的动能 T_N，

(6)各电子的自旋磁矩和轨道磁矩间的相互作用能，

(7)各核自旋磁矩与电子磁矩间的相互作用能．

其中(1)、(2)、(3)三项能量之和构成分子的电子能量 E^{el}．它是离散的，形成一系列电子能级．每个能级的能量值还与各个核的瞬时位置坐标（即分子中核的几何构形）有关．由于后面将要讲到的原因，人们把 E^{el} 和第(4)项 V_{NN}（它也是核的几何构形的函数）合在一起称为等效势能曲线（或等效势能曲面，下同）．若势能曲线能够在某个核的几何构形下达到极小值 E_e，则 E_e 就规定为相应的电子能级的值．各电子能级间的间隔较大，它们之间的跃迁一般对应于电磁波的紫外或可见光波段．

第(5)项 T_N 是各个核的动能之和. 可以把 T_N 看成是整个分子质心运动的动能与各个核相对于质心运动的动能这两部分合成的. 前一部分不需要考虑,后一部分动能又可分解为核(在等效势能场中运动)的振动能 E_{vib} 与核(围绕分子质心转动)的转动能 E_{rot}.(注意:本书中"核的转动能"均指整个分子构形中各个核绕质心的转动能量,不要与"核自旋"相混.)

振动能级和转动能级也都是离散的. 振动能级之间的间隔比电子能级小,一般相当于红外的跃迁. 转动能级间的间隔更小,一般对应于远红外、亚毫米波、毫米波和厘米波的跃迁. 而且,对于不同的分子结构(如线型分子、对称陀螺分子等)还要分别讨论.

第(6)项造成电子能级的精细结构. 第(7)项造成能级的超精细结构.

综上所述,如果我们暂不考虑(6)、(7)二项,则大多数情况下,可以近似把分子的总能量 E 看成是电子能量 E_e(包括(1)、(2)、(3)和(4)四项),核的振动能量 E_{vib}和核的转动能量 E_{rot}三者之和:

$$E = E_e + E_{vib} + E_{rot}$$

而且一般情况下,有

电子能级间隔≫振动能级间隔≫转动能级间隔

这一点很重要,它形成分子能级和光谱的基本特征,并使分子光谱的分析有规可循,相对地减小了复杂性.

实际上,上述几种运动之间并不是独立的,例如振动运动会对转动运动产生影响. 但我们可以先把分子能量的各部分分开讨论,得出近似结果,然后再考虑各种运动之间的相互影响,用它们作为高次效应来修正.

§2.2 原子、分子的薛定谔方程 Born-Oppenheimer 近似

在讨论分子的薛定谔方程之前，先回顾一下原子的薛定谔方程是有帮助的.

1. 氢原子和类氢离子的薛定谔方程

这是一个原子核和一个核外电子组成的二粒子系统，电子质量为 m_e，电荷为 $-e$，原子核质量为 m_N，电荷为 $+Ze$，核和电子绕共同的质心转动. 量子力学中已经证明，只须把 m_e 换成约化质量 μ，便可等效于一个粒子在中心库仑场中的运动. 若不考虑电子自旋、核自旋和相对论效应，则哈密顿算符只有两项：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \tag{2.2.1}$$

其中右边第一项相当于质量为 μ 的粒子的动能，第二项为体系的势能 $V(x,y,z)$. 对于氢原子($Z=1$)，有

$$V(x,y,z) = V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

故氢原子的薛定谔方程为：

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}\right)\Psi_j = E_j\Psi_j$$

2. 多电子原子的薛定谔方程

现在是 N 个电子绕一个核(质量为 m_N，电荷为 $+Ze$)运动，属于多体问题. 如认为核的质量很大，可看做是不动的，而且仍旧不考虑电子和核的自旋，则体系的哈密顿量 $\hat{H}$ 可写为

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^{N}\frac{\hat{p}_k^2}{2m_e} - \sum_{k=1}^{N}\frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{k>j}\frac{e^2}{(\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j)} \tag{2.2.2}$$

其中，第一项是各个电子的动能，第二项为各电子在核的中心库仑场中的势能，第三项为各个电子之间的相互作用势能.

由于第三项的出现造成数学上的困难，这种问题一般无分析解，只能用各种近似方法或求数值解.

3. 分子的薛定谔方程

分子和原子相比，基本的差别是，分子中的原子核不止一个. 所以其哈密顿算符 $\hat{H}$ 更复杂. 我们先考虑分子总能量中的主要项，即：核的动能 T_N，电子的动能 T_e，核与核之间、核与电子之间以及电子与电子之间的势能 $V_{NN}+V_{Ne}+V_{ee}$. 此外的各个电子自旋磁矩和各个轨道磁矩之间的相互作用能、核磁矩与上述各磁矩间的相互作用能等等(这些对星际分子问题都是重要的)，都暂时忽略不计，待下一步再作为微扰处理. 于是得出分子的哈密顿算符为

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{T}_N + \hat{T}_e + \hat{V}_{NN} + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee} + \cdots \\ &= -\sum_\alpha \frac{\hbar^2}{2m_{N\alpha}}\nabla_\alpha^2 - \sum_j \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_j^2 + \sum_{\alpha>\beta}\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|\boldsymbol{R}_\alpha - \boldsymbol{R}_\beta|} \\ &\quad - \sum_\alpha\sum_j \frac{Z_\alpha e^2}{|\boldsymbol{R}_\alpha - \boldsymbol{r}_j|} + \sum_{j>k}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_k|} + \cdots \end{aligned} \tag{2.2.3}$$

其中各符号的意义分别是：$m_{N\alpha}$为第 α 个核的质量，$Z_\alpha e$ 为第 α 个核的电荷，$\boldsymbol{R}_\alpha$、$\boldsymbol{r}_j$ 分别为第 α 个核及第 j 个电子的位置坐标，一般取分子质心为坐标原点，$\sum\limits_\alpha$ 对 N 个核求和，$\sum\limits_j$ 对 n 个电子求和.

分子的薛定谔方程由(2.2.3)式代入

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{2.2.4}$$

构成，其中 $\Psi=\Psi(R,r)=\Psi(\boldsymbol{R}_1,\cdots,\boldsymbol{R}_N,\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_n)$.
这是一个 $3N+3n$ 维的二阶偏微分方程. 虽然在哈密顿量 $\hat{H}$ 中已经忽略了相对来讲能量较小的项，但是数学上仍极复杂，一般只能采用各种近似方法处理.

4. Born-Oppenheimer 近似

Born-Oppenheimer 近似是一种常用的近似. 它的主要思路是把电子的运动和核的运动分离开来考虑，忽略它们之间的相互影

响，以便分别计算，从而使问题大大简化.

这种处理方法在物理上的基本根据是：由于核的质量远大于电子质量，在分子质心坐标中核的运动远比电子的运动慢. 因此，当计算电子的运动时，可以近似地认为核是静止的，而把核的运动所产生的影响忽略. 这样，电子的运动状态 $\Psi_e(r,R)$ 和相应的电子能量 $E^{el}(R)$（包括电子的势能和动能）便只依赖于各个核的瞬时位置，而与核的运动无关. 我们把各个核的瞬时位置 $\boldsymbol{R}_a$ 简写为 R，它以参量的形式出现在电子的波函数 $\Psi_e(r,R)$ 中. 对每一组给定的核的瞬时位置 R，分子具有若干个离散的电子能量值 $E^{el}(R)$，对应着分子的不同的电子态. 注意，对于不同的电子态，$E^{el}(R)$ 对 R 的依赖关系是不同的.

另一方面，当考虑核的位置 R 的改变（即核的运动）时，同样地由于电子运动远比核快，我们仍然不必把核的运动和电子运动同时计算，而只须考虑电子在每一种核的瞬时位置下运动的平均效果，即直接计算出对应每种核的瞬时位置的电子能量值，再考虑它对核的位置改变的影响. 容易看出，当核的位置改变时，不仅需要为反抗原子核之间的斥力而做功，还需要为相应地改变电子能量而做功. 换言之，电子能量 $E^{el}(R)$ 与原子核的库仑势能 $V_{NN}(R)$ 之和起着使原子核做振动运动的等效势能的作用. 图 2.1（见下页）给出两个等效势能的例子.

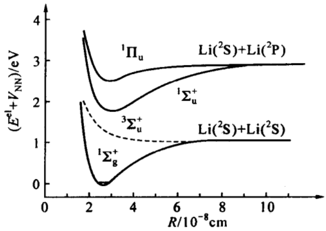
下面，我们定量地考察上述简化的物理考虑怎样在量子力学的计算中体现出来.

既然核的运动与电子运动无关，整个分子的波函数 $\Psi(R,r)$ 便可以写为核的波函数 Ψ_N 与电子波函数 Ψ_e 的乘积：

$$\Psi(r,R) = \Psi_N(R) \cdot \Psi_e(r,R)$$

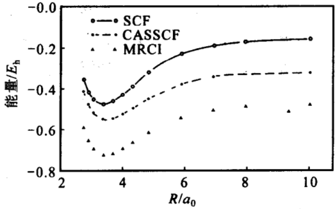
这里 $\Psi_e(r,R)$ 中的 R 是以参量的形式出现，表示 Ψ_e 所对应的各个核的瞬时位置（即核的瞬时几何构形）.

先把 $\Psi_N(R) \cdot \Psi_e(r,R)$ 代入分子的薛定谔方程(2.2.4)式，有



(a) Li_2 分子在不同电子态的势能曲线，等效势能为 $E_e(R)+V_{NN}(R)$

（取自 R. S. Mulliken, Rev. Mod. Phys, 1932, 4: 1.）



(b)用 3 种从头计算法算出的 SiS 分子电子态 $X\,^1\Sigma^+$ 的 3 条势能曲线.

（取自 Li Shouzhong et al, Chem. Phys. Letters, 1988, 151: 403）

图 2.1　两个等效势能的例子(图中的横坐标 R 都代表分子中两个原子核的距离)

$$\hat{H}(\Psi_N(R)\cdot\Psi_e(r,R)) = E(\Psi_N(R)\cdot\Psi_e(r,R))$$

按(2.2.3)式，它即是

$$-\sum_{\alpha}\frac{\hbar^2}{2m_{N\alpha}}\nabla_\alpha^2(\Psi_e(r,R)\Psi_N(R))-\sum_j\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_j^2(\Psi_e(r,R)\Psi_N(R))$$
$$+(\hat{V}_{NN}+\hat{V}_{Ne}+\hat{V}_{ee})(\Psi_e(r,R)\Psi_N(R))=E(\Psi_N(R)\Psi_e(r,R))\tag{2.2.5}$$

左边第一项$\nabla_\alpha^2(\Psi_e(r,R)\Psi_N(R))$中，$\nabla_\alpha$ 是对核的坐标 R_α 微分. 由于 Ψ_e 中也含有 R_α，故对每一个 R_α 都有

$$\nabla_\alpha^2(\Psi_e\Psi_N)=\Psi_e\nabla_\alpha^2\Psi_N+2\nabla_\alpha\Psi_N\nabla_\alpha\Psi_e+\Psi_N\nabla_\alpha^2\Psi_e$$

Born-Oppenheimer 近似中，认为$\nabla_\alpha\Psi_e$ 和$\nabla_\alpha^2\Psi_e$ 很小. 物理意义就是核的运动对电子状态 $\Psi_e(r,R)$影响不大. 换言之，电子状态 $\Psi_e(r,R)$随 R 的变化很慢，以致$\nabla_\alpha\Psi_e$ 和$\nabla_\alpha^2\Psi_e$ 都可以忽略不计. 在这个近似条件下，(2.2.5)式左边第一项可用下式简化：

$$\nabla_\alpha^2(\Psi_e\Psi_N)\approx\Psi_e\nabla_\alpha^2\Psi_N\tag{2.2.6}$$

对(2.2.5)式左边第二项，因 $\Psi_N(R)$不依赖电子坐标 r，故有

$$\nabla_j^2(\Psi_e(r,R)\Psi_N(R))=\Psi_N(R)\nabla_j^2\Psi_e(r,R)\tag{2.2.7}$$

把(2.2.6)、(2.2.7)式代入(2.2.5)式，方程简化为

$$\Psi_e\left(-\sum_\alpha\frac{\hbar^2}{2m_{N\alpha}}\nabla_\alpha^2\Psi_N\right)+\Psi_e\hat{V}_{NN}\Psi_N+\Psi_N\left(-\sum_j\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_j^2\Psi_e\right)$$
$$+(\hat{V}_{Ne}+\hat{V}_{ee})\Psi_e\Psi_N=E\Psi_e\Psi_N\tag{2.2.8}$$

改写得：

$$\Psi_e\left(-\sum_\alpha\frac{\hbar^2}{2m_{N\alpha}}\nabla_\alpha^2\Psi_N\right)+\Psi_e\hat{V}_{NN}\Psi_N+\left[\left(-\sum_j\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_j^2\right.\right.$$
$$\left.\left.+\hat{V}_{Ne}+\hat{V}_{ee}\right)\Psi_e\right]\Psi_N=E\Psi_e\Psi_N\tag{2.2.9}$$

现在再定义一个哈密顿算符 $\hat{H}_e$，它代表在某种核的几何构形下，各个电子的动能和势能的总和：

$$\hat{H}_e=\sum_j\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla_j^2+V_{Ne}+V_{ee}\tag{2.2.10}$$

并且认为 Ψ_e 满足方程

$$\hat{H}_e\Psi_e(r,R) = E^{el}(R)\Psi_e(r,R) \qquad (2.2.11)$$

此处注意 $\hat{H}_e$ 中含有 R 作为参变量(它来源于 V_{Ne} 一项),当 R 不同时,$E^{el}(R)$、$\Psi_e(r,R)$均随之变化.

利用(2.2.9)、(2.2.10)、(2.2.11)式,我们便把解(2.2.5)式这个数学上极复杂的问题变为解下列两个相对简单的子问题:

(1)求解

$$\hat{H}_e\Psi_e(r,R) = E^{el}(R)\Psi_e(r,R) \qquad (2.2.11)$$

即

$$\left(\sum_j \frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla_j^2 - \sum_\alpha\sum_j \frac{Z_\alpha e^2}{|\boldsymbol{R}_\alpha - \boldsymbol{r}_j|} + \sum_{j>k}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_k|}\right)\Psi_e = E^{el}\Psi_e \qquad (2.2.12)$$

解出的 $\Psi_e(r_1,r_2,\cdots,r_n,R)$代表分子的电子运动状态,$E^{el}(R)$为电子能量. 从(2.2.10)和(2.2.12)式可知 $E^{el}(R)$包括电子的动能 T_e,电子之间的势能 V_{ee},电子与核的势能 V_{Ne},它们都依赖于分子中核的(瞬时的)几何组态. 这是因为 R 不同时,电子所受的库仑力场不同,故相应的状态和能量也不同.

(2)求出 $E^{el}(R)$后,把(2.2.12)式代入(2.2.9)式,有

$$\Psi_e\left(-\sum\frac{\hbar^2}{2m_{N\alpha}}\nabla_\alpha^2\Psi_N\right) + \Psi_e V_{NN}\Psi_N + \Psi_e E^{el}\Psi_N - \Psi_e E\Psi_N = 0$$

或

$$\Psi_e\left[-\sum\frac{\hbar^2}{2m_{N\alpha}}\nabla_\alpha^2 + V_{NN} + E^{el} - E\right]\Psi_N = 0$$

因

$$\Psi_e \neq 0$$

故有

$$\left[-\sum\frac{\hbar^2}{2m_{N\alpha}}\nabla_\alpha^2 + V_{NN} + E^{el} - E\right]\Psi_N = 0 \quad (2.2.13)$$

即

$$\left[-\sum\frac{\hbar^2}{2m_{N\alpha}}\nabla_\alpha^2 + V_{NN}(R) + E^{el}(R)\right]\Psi_N(R) = E\Psi_N(R) \qquad (2.2.13')$$

由此式看出，对于求核的波函数$\Psi_N(R)$而言，在(2.2.13′)式中，电子能量$E^{el}(R)$与$V_{NN}(R)$一起，起着等效势能的作用. 它正是体现了前面谈到的物理解释. 以后，我们就称$E^{el}(R)+V_{NN}(R)$为等效势能$V_{eff}(R)$. 以上我们所用的R表示各个核的瞬时位置$\boldsymbol{R}_a$. 对多原子分子，描述核的几何构形的变量较多，这时一般把$E^{el}(R)+V_{NN}(R)$称为势能曲面. 双原子分子中，可以把两个原子的位置坐标$\boldsymbol{R}_1$，$\boldsymbol{R}_2$归结为两个原子的核间距. 令$|\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2|=R$，等效势能便可表示为$V_{eff}(R)=V_{NN}(R)+E^{el}(R)$随核间距$R$变化的势能曲线，图2.1便是一例.

如果势能曲线(面)有一极小值，它所对应的电子状态便是分子的一个稳定态. 如果势能曲线(面)没有极小值，则对于任何一种核的组态，分子中的各原子都是互相排斥，因而相应的电子状态是不稳定的.

按§2.1所述，核的等效势能$E^{el}(R)+V_{NN}(R)$加上核相对于分子质心的动能$T_N(R)$(参看(2.2.13′)式)就是分子的总能量E. 通常都把每个电子运动状态的等效势能曲线(面)的极小值规定为该状态的电子能级的能量，用符号E_e来表示(注意，E_e与E^{el}的意义不同)；并且把分子的最低电子态的极小值选做分子能级标度的零点(这与原子能级零点的选法不同). 对每一电子状态，若势能曲面已由(2.2.12)式求出，则分子能量E可通过解方程(2.2.13′)得出. 我们把E超过E_e的部分看做是核的动能，包括平常所说的分子的振动能E_{vib}及转动能E_{rot}(参看后面图2.2). 但必须记住，核振动的势能(等效势能！)中的一部分(即E^{el})本来就是电子能量.

至此，解方程(2.2.1)式的问题变为解方程(2.2.12)式和解方程(2.2.13′)式两个子问题. 下一步我们会看到，在一定条件下波函数$\Psi_N(R)$还可分解为核的振动波函数和核的转动波函数两个相互独立的部分. 相应地，核的动能也将分为振动能和转动能两部分相加(见§2.4). 即

$$\Psi_N \to \Psi_{vib} \cdot \Psi_{rot};(E - E_e) \to E_{vib} + E_{rot}$$

这样我们得到，在不计电子自旋磁矩和轨道磁矩以及核自旋磁矩的影响时，可以在 Born-Oppenheimer 近似条件下，认为

$$\Psi = \Psi_e \cdot \Psi_{vib} \cdot \Psi_{rot} \tag{2.2.14}$$

$$E = E_e + E_{vib} + E_{rot} \tag{2.2.15}$$

即可以把电子运动、振动、转动分开讨论.

实际上，电子运动、振动、转动之间是存在着相互影响的. Born-Oppenheimer 近似未考虑这些相互影响，可视为是一种零级近似，在此基础上再考虑上述相互影响加以修正. 这些问题今后将在适当的章节中分别进行讨论.

实验表明，一般情况下，有 $E_e \gg E_{vib} \gg E_{rot}$. 因此，分子的能级图可示为如图 2.2(见下页)，其中用 v 标记的为振动能级，用 J 标记的为转动能级. 即每个电子运动状态中，可以有一系列离散的振动状态；对每个振动状态，又可以有一系列离散的转动状态.

这些能级之间的跃迁产生分子光谱，大致有以下三种类型：

第一种是纯转动光谱. 它对应于同一个电子能级内的同一个振动能级中的不同转动能级之间的跃迁. 换言之，在这类跃迁中，分子的电子状态和振动状态都不改变，只有转动状态发生改变. 这种谱线一般落在微波或远红外波段.

第二种是振-转光谱. 它对应于同一个电子能级内的两个不同的振动能级中的各个转动能级之间的跃迁. 在这类跃迁中，分子的电子状态不变，但振动状态发生改变. 由于每个振动能级中都包含有许多不同的转动能级，众多的允许跃迁就形成密集的带状谱线，也叫振-转光谱带. 它的波长一般落在中、近红外波段.

第三种是电子振-转光谱. 它对应于不同的两个电子能级内的各个不同的振动、转动能级之间的跃迁. 在这类跃迁中，分子在跃迁前后的电子能级、振动能级和转动能级都是不同的. 由于电子能级之间的能量间隔较大，电子振-转光谱线的波长一般落在紫外或

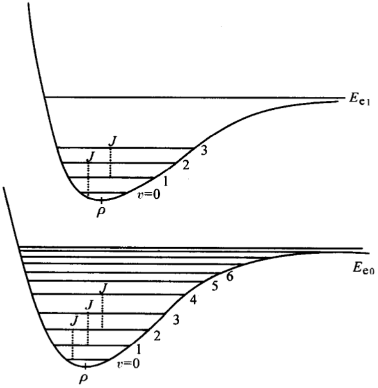


图 2.2 分子的两个电子能级 E_{e0}和 E_{e1}的振动能级和转动能级的示意图
(取自参考资料[1]p.163)

可见光波段,形成密集的带状谱线.

§2.3 电子能级和势能曲线

对电子能级我们只做简单讨论.分子的不同电子运动状态(或称分子轨道)之间能量差很大,约与原子中各电子状态间的能量差处于同等量级(1～20 eV,即在可见及紫外波段).

我们已把 $E^{el}(R)+V_{NN}(R)$的极小值规定为电子能级 E_e的值,

而 $E^{el}(R)$ 是(2.2.12)式的本征值．由于 V_{Ne} 和 V_{ee} 不是有心力场，所以(2.2.12)式很难求解．为此发展了各种近似算法，如自洽场方法等，可近似求解．还有一种方法是利用计算机对(2.2.12)式求数值解，即量子化学的“从头计算法”．它可以达到较高的精度，近年来已被广泛采用，成为理论计算的主要手段．图 2.1(b)已给出一例，这里不详细介绍．但可以指出，和原子的电子能级类似，分子中各个不同的电子态的能量本征值也是离散的，并且每个能级也可以用若干个具有特定物理意义的量子数表征．下面以双原子分子为例，简单介绍怎样用这些量子数表征分子的电子能级．

原子光谱中，当电子组态确定后，在罗-桑耦合的条件下(多数原子属于这种情形)是用 $^{2S+1}L_J$ 标志一个电子态，按习惯称之为“光谱项”，其中 L、S、J 的意义如下：

L 为电子的总轨道角动量量子数，电子总轨道角动量 $|\boldsymbol{L}|=L(L+1)\hbar$，由每个电子的轨道角动量 $\boldsymbol{l}_j$ 耦合而成(j 为电子标号)．

S 为电子的总自旋角动量量子数，电子总自旋角动量 $|\boldsymbol{S}|=S(S+1)\hbar$，由每个电子的自旋角动量 $\boldsymbol{s}_j$ 耦合而成．

$\boldsymbol{J}$ 为电子的总角动量(包括电子自旋和轨道角动量，不包括核自旋 I)，由 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 耦合而成．$|\boldsymbol{J}|=J(J+1)\hbar$，$J$ 为电子总角动量量子数，它可取 $L+S,L+S-1,\cdots,|L-S|$ 等各个相差为 1 的值．

当 L、S、J 取值不同时，原子的能量不同，所以用它们标志能级是很方便的．

分子光谱沿用了类似的方法．对于双原子分子，它的每个电子在两个核和其它电子的电场中运动，每个电子有一定的运动状态(轨道)，故有相应的轨道角动量 $\boldsymbol{l}_j$．各个 $\boldsymbol{l}_j$ 之间的相互作用很强，耦合成 $\boldsymbol{L}$，即电子的总轨道角动量．只是双原子分子中电子受到的电场是一个轴对称电场，和原子的有心力场有所不同．电场的轴形成空间的特定方向，$\boldsymbol{L}$ 将对此方向空间量子化．即 $\boldsymbol{L}$ 的沿轴场方向

的分量将取值为 $M_L \frac{1}{\hbar}$，且 M_L 仅能取 $M_L=L,L-1,\cdots,-L+1,-L$，共 $(2L+1)$ 个值. 这和磁场中的空间量子化类似. 但有一点不同，在磁场中，不同的 M_L 值，对应不同的能量，故共有 $2L+1$ 个能量值. 但在电场中 $M_L=L$ 和 $M_L=-L$ 的能量是一样的，即 $|M_L|$ 相同的态能量相同，这是由于 M_L 的反号相当于电子运动方向反向，而电子在电场中反向运动时，系统的能量是不变的. 所以现在 M_L 和 $-M_L$ 两个态能量相同，而 $|M_L|$ 不同的态能量不同. 在这种情况下，我们不用 L，也不用 M_L，而改用 $|M_L|$ 来代表能级更方便. 它起的作用犹如原子光谱中的 L，为了和它对应，在分子光谱中就用希腊字母 $\Lambda=|M_L|$ 来表示能级，而 Λ 取 $0,1,2,\cdots,L$，共 $L+1$ 个正值.

原子光谱中，当 $L=0,1,2,3,\cdots$ 时，分别用 S，P，D，F，…来代表. 在分子光谱中沿用这个习惯，分别用 Σ，Π，Δ，Φ，…来代表 $\Lambda=0,1,2,3,\cdots$ 的各个态. 注意其中每个态(除 Σ 以外)均含有对应于 $M_L=\pm\Lambda$ 的二重简并.

对于电子自旋作如下的处理. 在分子中，各个电子自旋 $\boldsymbol{s}_j$ 耦合成总自旋角动量 $\boldsymbol{S}$，对于 $\Lambda\neq 0$ 的态，由于电子轨道运动在核间轴方向还将出现一个内磁场，$\boldsymbol{S}$ 便绕此磁场运动并保持它在轴上的投影值 $M_S\hbar$ 为常数. 为了和前面的处理一致，在分子光谱中，令 $\Sigma=M_S$ 来表示总自旋角动量的投影量子数. 但现在 $+M_S$ 和 $-M_S$ 的能量并不相同，所以 Σ 可以是正值，也可以是负值，即

$$\Sigma = M_S = S, S-1, \cdots, -S+1, -S$$

共有 $2S+1$ 个取值. (对 $\Lambda=0$ 的 Σ 态，Σ 的 $2S+1$ 个值所对应的能量相同). (注意！斜体的 Σ 表示总自旋角动量的投影，不要与代表 $\Lambda=0$ 的 Σ 态的正体的 Σ 相混).

$\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 之间磁相互作用使它们耦合成电子的总角动量. 在原子光谱中，$\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 耦合的结果是总角动量 $\boldsymbol{J}$，而总角动量量子数 J

取值为

$$J = L + S, L + S - 1, \cdots, |L - S|$$

但在双原子分子光谱中，由于分子核间轴的存在，考虑角动量在轴上的投影相加更有意义. 所以当 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 与轴耦合很强时，可取其投影值相加，即令

$$\Omega = |\Lambda + \Sigma| \tag{2.3.1}$$

Ω 相当于电子总角动量在轴对称场方向投影的量子数. 当 $\Lambda \neq 0$ 时，对给定的 Λ，$\Lambda+\Sigma$ 有 $2S+1$ 个不同的取值. 由于 S 和 Λ 之间存在磁相互作用（自旋轨道耦合），$\Lambda+\Sigma$ 不同的取值相当于不同的能级，即对同一个 Λ，有 $2S+1$ 个子能级，这相当于原子光谱中的精细结构. 当 $\Lambda=0$ 时（即 Σ 态），沿分子核间轴方向无磁场，量子数 Σ 无意义. 能级也不分裂为 $2S+1$ 个子能级. 另外，当 $\Lambda \geqslant S$ 时，Ω 也有 $2S+1$ 个取值.

对于双原子分子，Λ，S，$\Lambda+\Sigma$ 是好量子数，因此用下列符号来表示其电子能级：

$$^{2S+1}\Lambda_{\Lambda+\Sigma} \tag{2.3.2}$$

这类似于原子光谱项中用 $^{2S+1}L_J$ 来表示电子能级. 例如，对于一个 $\Lambda=2$，$S=1$ 的分子状态，其电子能级（包括自旋和轨道）可用下列符号表示：

$$^3\Delta_3, {}^3\Delta_2, {}^3\Delta_1 \tag{2.3.3}$$

其中 Δ 表示 $\Lambda=2$，下角标反映 $\Lambda+\Sigma$ 的值，而上角标反映多重性. 对 $\Lambda=1$，$S=\dfrac{3}{2}$ 的情况，则有 4 个能级：

$$^4\Pi_{\frac{5}{2}}, {}^4\Pi_{\frac{3}{2}}, {}^4\Pi_{\frac{1}{2}}, {}^4\Pi_{-\frac{1}{2}} \tag{2.3.4}$$

大多数双原子分子的基电子态为 $^1\Sigma$（即，$\Lambda=0$，$S=0$），但 OH 和 NO 的基电子态为 $^2\Pi$.

除了这些量子数之外，我们还在电子态（或称光谱项）符号的右上角用一个“＋”或“－”号来表示电子波函数的空间对称性，如

Σ^+、Σ^-等. 对双原子分子和线性多原子分子来讲,"+"号与"−"号分别表示当非简并态(即 Σ 态)的电子本征函数相对于包含轴的平面反演时,保持或改变符号的性质. 正号对应的是经过由上述核间轴的平面反演之后,电子本征函数保持不变的电子态,写成 Σ^+;负号对应的是经由上述平面反演之后,电子本征函数改变符号的电子态,写成 Σ^-.

另外,如果双原子分子中的两个核具有相同的电荷数(即同核分子如$^{16}O^{16}O$,$^{16}O^{18}O$),则电子所处的电场除对称轴外还有一个对称中心,当电子轨道波函数相对于对称中心反演时(即所有的电子坐标 $\boldsymbol{r}$ 都用其负值 $-\boldsymbol{r}$ 代替时),本征函数只能是不变或改号,前者对应的为偶态,后者对应的是奇态. 这种对称性质分别用电子态符号的右下标 g(偶态)或 u(奇态)来表示(来自德语"gerade"和"ungerade")如 Σ_g、Σ_u、Π_g、Π_u 等. 通常杂原子核的双原子分子没有这种 g/u 的反转对称性,但具有上述的+、−反射对称性.

前面说过,分子中的每一个电子状态可用一个势能曲线(面)表示,并且规定了势能曲线的极小值处为相应的电子能量值 E_e,势能曲线与振动、转动都有关系,下面对势能曲线的某些性质再做进一步的讨论. 为了简单,以双原子分子为例,多原子分子可按此推想.

设某双原子分子有核 A 和 B,相距为 $|\boldsymbol{R}_A-\boldsymbol{R}_B|=R$,如图 2.3 (见下页).

容易肯定:

(1)平衡时,两原子之间吸引力与斥力应互相平衡. 对一个稳定的分子,势能曲线就有一个极小值,此时 $E^{el}(R)+V_{NN}(R)$对 R 的微商为零,就是说,这一点上既无排斥力也无吸引力. 我们称这个平衡点为 R_0.

(2)当 R 小于平衡距离且趋于零时,$E^{el}(R)+V_{NN}(R)\to\infty$. 此时斥力起主要作用,而且越来越强(否则两个核将碰到一起).

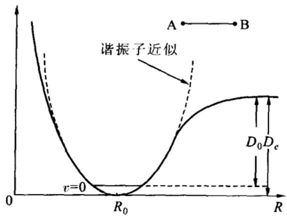


图 2.3　双原子分子势能曲线示意图(注意,实际上基态分子是处于 $v=0$ 的振动能级上,所以解离能不是 D_e 而是 $D_0=D_e-E_{\rm vib}(v=0)$)

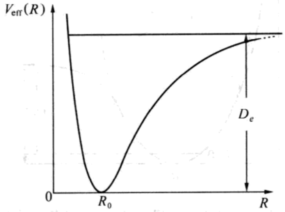
(3)在 R 大于平衡距离时,在某个范围内,吸引力应起主要作用,(这种吸引力把两个原子结合在一起成为分子)所以势能曲线的斜率是正的. R 进一步增加时,吸引力即减少,然后逐渐消失,曲线趋于水平线,斜率趋于零. 显然,D_0 为分子的解离能.

(4)在 R_0 附近,作为一级近似可以认为,势能曲线是一个抛物线. 抛物线形式的势能对应一个谐振子,而谐振子的方程是很易求解的. 对抛物线的偏离可以作为高次修正.

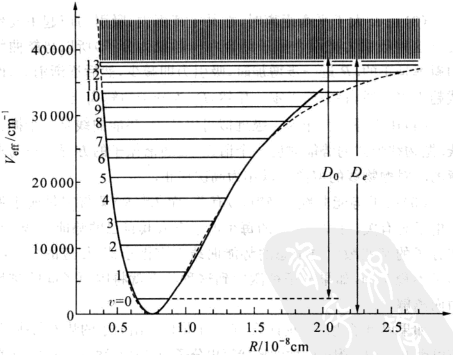
(5)由于势能曲线与 $E^{\rm el}(R)$ 有关,而 $E^{\rm el}(R)$ 又与它是属于哪个电子态有关. 所以,分子的每个电子态有其自己的势能曲线. 有些分子的某些激发电子态的势能曲线没有极小值,相应的分子状态是不稳定的,如果分子被激发到这种状态就将因原子间的排斥力而离解.

如果用量子化学理论计算,能够定量地求出分子的势能曲线,就可以由 R_0 及 R_0 附近的曲线形状算出分子的转动常数、振动频率等重要谱线参数,以与实验求得的光谱比较. 反过来也可采用某种带有可调参数的势能函线,用实验测得的光谱参数来确定势能函数中的参

数. 最广泛使用的是莫尔斯(Morse)势能函数(见图 2.4),可表为



(a)Morse 势能曲线



(b)H_2 分子基态势能曲线及振动能级(虚线为 Morse 势能曲线)

图 2.4(取自参考资料[2],P.74)

$$E^{el}(R) + V_{NN}(R) = V_{eff}(R) = D_e(1 - e^{-\alpha(R-R_0)})^2 \tag{2.3.5}$$

它能满足上面定性讨论中的条件:(1)在核间距很大时,两个原子间的作用力为零,即势能为一常数(等于分子的离解能). (2.3.5)式中的 D_e 即为分子的离解能(相当于 $R\to\infty$ 时的相互作用能与最低势能之差). (2)在 R 很小时,斥力起主要作用,且越来越强. (3)在平衡位置上,斥力与引力平衡,势能最小. 式中的 R_0 即核之间平衡距离,$(R-R_0)$ 很小时,$V_{eff}(R)\approx D_e\alpha^2(R-R_0)^2$ 恰为线性谐振子时的抛物线形状的势能曲线(α 是依赖分子中电子态的一个常数).

§2.4　振动与转动的分离

在§2.2的最后部分说过,核的波函数 Ψ_N 可以用振动波函数和转动波函数的乘积 $\Psi_{vib}\cdot\Psi_{rot}$ 表示,这一节中具体说明这个问题. 仍以双原子分子为例.

双原子分子的原子核有两个,在 Born-Oppenheimer 近似下,核的波函数满足薛定谔方程(2.2.13′)式

$$\hat{H}_N\Psi_N = E\Psi_N \tag{2.4.1}$$

其中

$$\hat{H}_N = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{N_1}}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{N_2}}\nabla_2^2\right) + \left[E^{el}(\boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2) + \frac{Z_1Z_2e^2}{|\boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2|}\right] \tag{2.4.2}$$

角标1,2分别表示是第1,2个原子的物理量. 式中右边后两项 $\left[E^{el}(\boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2)+\frac{Z_1Z_2e^2}{|\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2|}\right]$ 就是这个双原子分子的等效势能 $V_{eff}(\boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2)$,$Z_1$,$Z_2$ 分别为两个核的电荷数.

在经典力学中,质点组的运动可以视为总质量的质心运动与

约化质量相对于质心运动之和. 在量子力学中也有类似的处理：现引进核的质心坐标 $\boldsymbol{R}$ 及核的相对坐标 $\boldsymbol{r}$：

$$\boldsymbol{R}=x\boldsymbol{i}+y\boldsymbol{j}+z\boldsymbol{k}=\frac{m_{N1}\boldsymbol{R}_1+m_{N2}\boldsymbol{R}_2}{m_{N1}+m_{N2}} \tag{2.4.3}$$

$$\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{i}+y\boldsymbol{j}+z\boldsymbol{k}=\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2 \tag{2.4.4}$$

（注意：本小节中以及后面的 $\boldsymbol{r}$ 都是表示核的相对坐标，而不是如§2.2中那样表示电子坐标.）

可以证明（例如参看周世勋《电子力学》72 页）：

$$\frac{1}{m_{N1}}\nabla_1^2+\frac{1}{m_{N2}}\nabla_2^2=\frac{1}{m_N}\nabla_R^2+\frac{1}{\mu}\nabla_r^2 \tag{2.4.5}$$

其中：

$$m_N=m_{N1}+m_{N2} \quad \text{（核的总质量）}$$

$$\mu=\frac{m_{N1}m_{N2}}{m_{N1}+m_{N2}} \quad \text{（核的约化质量）} \tag{2.4.6}$$

$$\nabla_R^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{（对质心坐标偏微分）} \tag{2.4.7}$$

$$\nabla_r^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{（对相对坐标偏微分）}$$

于是方程(2.4.2)可改写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_N}\nabla_R^2-\frac{h^2}{2\mu}\nabla_r^2+V_{\text{eff}}(r)\right]\boldsymbol{\Psi}_N=E\boldsymbol{\Psi}_N \tag{2.4.8}$$

式中 $V_{\text{eff}}(r)=E^{\text{el}}(|\boldsymbol{r}|)+\frac{Z_1Z_2e^2}{|\boldsymbol{r}|}$，与 E^{el} 的形式有关. 在双原子分子中，E^{el} 只是核间距 $r=|\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2|=|\boldsymbol{r}|=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ 的函数，即只含相对坐标，所以 V_{eff} 可表为 r 的函数. 这样，方程(2.4.8)便可以分离变量. 令

$$\boldsymbol{\Psi}_N=\boldsymbol{\Psi}'_c(\boldsymbol{R})\boldsymbol{\Psi}'_N(\boldsymbol{r}) \tag{2.4.9}$$

代入(2.4.8)式，分离变量后得

$$-\frac{\hbar^2}{2m_N}\nabla_R^2\boldsymbol{\Psi}'_c(\boldsymbol{R})=E_c\boldsymbol{\Psi}_c(\boldsymbol{R}) \tag{2.4.10}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2+V_{\rm eff}(r)\right)\boldsymbol{\Psi}'_{\rm N}(\boldsymbol{r})=(E-E_{\rm c})\boldsymbol{\Psi}'_{\rm N}(\boldsymbol{r}) \qquad (2.4.11)$$

(2.4.10)式描述质心的运动，是一个质量为 $m_{\rm N}$ 的自由粒子的波动方程，$E_{\rm c}$ 是质心运动能量，这部分与我们研究的分子体系的内部运动无关，我们不感兴趣.(2.4.11)式描述分子内部两个核的相对运动. 它的形式类似于氢原子的薛定谔方程，只是势能不一样.

对这种势能项只含 r 的方程，用球坐标求解是很方便的，即将 $\boldsymbol{r}(x,y,z)$ 变换为 $\boldsymbol{r}(r,\theta,\varphi)$. 球坐标中的变量 r 就是两个核之间的距离. 变换后，(2.4.11)式中的哈密顿算符

$$\hat{H}_{\rm N}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2+V_{\rm eff}(r) \qquad (2.4.12)$$

变为

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\rm N}&=-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{1}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\\&\quad\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]+V_{\rm eff}(r)\\&=-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{1}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+V_{\rm eff}(r)+\frac{1}{2\mu r^2}\hat{l}^{\,2}\end{aligned} \qquad (2.4.13)$$

其中

$$\hat{l}^{\,2}=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

是角动量平方的算符. 而(2.4.11)式中波函数 $\boldsymbol{\Psi}'_{\rm N}(\boldsymbol{r})$ 变为

$$\boldsymbol{\Psi}'_{\rm N}(r,\theta,\varphi)=R(r)\boldsymbol{\Theta}(\theta)\boldsymbol{\Phi}(\varphi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (2.4.14)$$

(注：原来 $\boldsymbol{\Psi}'_{\rm N}(\boldsymbol{r})$ 中的 $\boldsymbol{r}$ 是用来简化表示核的相对坐标，它可以是指(x,y,z)，也可以是指(r,θ,φ)，而 $R(r)$ 中的 r 是特指选用球坐标时的径向距离.)

在(2.4.14)式中，$R(r)$满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{1}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+V_{\rm eff}(r)\right]R(r)=E_{\rm vib}R(r) \qquad (2.4.15)$$

它的具体形式与 $V_{\rm eff}(r)$ 有关. 但既然 $\boldsymbol{\Psi}'_{\rm N}$ 中只有 $R(r)$ 是 r 的函

数，可见 $R(r)$ 是反映核的径向相对运动，也就是反映振动的波函数. E_{vib} 是振动能量本征值. 当 $V_{eff}(r)$ 对 r 的函数是严格的抛物线时，(2.4.15)式将正好代表简谐振子的波动方程.

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 是 $\hat{l}^2$ 的本征函数，满足

$$\left[\frac{1}{2\mu r^2}\hat{l}^2\right]Y_{lm}(\theta,\varphi)=E_{rot}Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \qquad (2.4.16)$$

它是球谐函数，普遍表达式为

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot\frac{2l+1}{4\pi}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

其中 $l=0,1,2,3,\cdots;m=l,l-1,\cdots,-l$.

波函数的这一部分反映转动运动，这从算符 $\frac{\hat{l}^2}{2\mu r^2}$ 所对应的经典的力学量 $\frac{\hat{l}^2}{2I}$（l 为角动量）恰好是转动能量就可明显看出. E_{rot} 是转动能量本征值.

于是，我们把振动和转动分开了. 注意，这里我们又作了一个假定，即振动对转动没有影响. 具体地说，就是不管振动状态如何，(2.4.16)式左边分母中的 r^2 不受影响. 实际上，振动对转动是有影响的，这一点以后再来修正.

至此，在 Born-oppenheimer 近似下得到的主要结果可归纳为：

分子的总能量 E 可认为是电子能量 E_e，振动能量 E_{vib}，转动能量 E_{rot} 之和：

$$E=E_e+E_{vib}+E_{rot}$$

相应地，分子的波函数 Ψ 可认为是电子波函数 Ψ_e，振动波函数 $R(r)$，和转动波函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 的乘积：

$$\Psi=\Psi_e\Psi'_N=\Psi_e\cdot R(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

注意，前面说过，Ψ_e 以电子坐标表示（但以核的坐标为参量）. 振动

波函数 $R(r)$ 以核的相对坐标 r 表示($R(r)$ 又通过 $V_{eff}(r)$ 受电子运动的制约). 转动波函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 以核的相对坐标 θ,φ 表示.

我们把上述结果作为零级近似,至于电子运动、核的振动、核的转动这三者之间的相互影响将在适当的时候考虑进去作为修正.

§2.5　振动能级

振动能级间的跃迁频率远远超过微波频率,我们只作简单介绍,仍以双原子分子为例.

量子力学的计算结果证明,当(2.4.15)式中的等效势能曲线与相对于平衡位置 r_0 的距离成抛物线关系时,即 $V(r)=\frac{1}{2}k(r-r_0)^2$ 时(图 2.5),就表示振子受到一个弹性力. k 是劲度系数,决定于抛物线的形状. 此时,方程的本征能量为

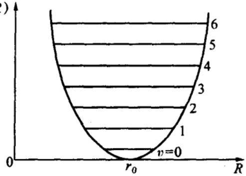


图 2.5　谐振子的势能曲线与能级的示意图

$$E_{vib}=\hbar\omega_0\left(v+\frac{1}{2}\right) \tag{2.5.1}$$

其中,$\omega_0=\sqrt{\frac{k}{\mu}}$,$\mu$ 为核的约化质量. $v=0,1,2,3,\cdots$为振动量子数. 这种势能曲线在经典力学中正是形成简谐振子的条件. (2.5.1)式是简谐振子的能级,它是等间隔的(图 2.5).

实际分子的势能曲线多少要偏离抛物线形状(图 2.6),故振动不是简谐的,应该作非谐修正. 计算表明,非谐振子的振动能为

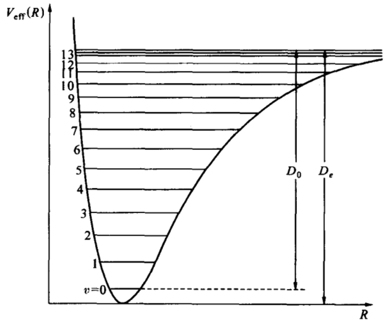


图 2.6 非谐振子的势能曲线与能级(取自参考资料[3],p. 138)

$$E_{\rm vib}=\hbar\omega_0\left(v+\frac{1}{2}\right)-x_e\hbar\omega_0\left(v+\frac{1}{2}\right)^2+y_e\hbar\omega_0\left(v+\frac{1}{2}\right)^3+\cdots \tag{2.5.2}$$

其中$|y_e|\ll x_e\ll 1$,x_e是正值,y_e可正可负. 非谐振子的能级不等距,其间隔随振动量子数v值的增大而减小. 图 2.6 中表示了这一情况.

如果采用(2.3.5)式的 Morse 势能曲线 $V(r)=D_e(1-e^{-\alpha(r-r_0)})^2$ 作为近似(这里用r,r_0代替(2.3.5)式中的R,R_0),可以算出(2.5.2)式中的ω_0,x_e与势能曲线中参数α,D_e的关系为

$$\omega_o=\alpha\sqrt{\frac{2D_e}{\mu}},\quad x_e=\frac{\alpha\hbar}{2}\sqrt{\frac{1}{2\mu D_e}} \tag{2.5.3}$$

如果采用较简单的 Dumham 型势能函数 $V(r)=\frac{1}{2}k(r-r_0)^2+\lambda(r-r_0)^3$ 作为近似,则有

$$\omega_0=\sqrt{\frac{k}{\mu}},x_e=\frac{15}{4}\lambda^2\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}\frac{1}{k^3} \tag{2.5.4}$$

以上各式的推导可参阅参考资料[3]中§11.5.不同的电子态势能曲线不同,所以振动能级情况也不同.

势能曲线对振动状态的影响是电子运动与振动运动间存在相互作用的表现,非谐修正做得越精确,就相当于把这种相互作用考虑得越周到.

势能曲线的右边水平渐近线的高度对应于解离能. 如果非谐振子获得比解离能更大的能量,则分子解离后两个原子将具有不等于零的动能. 这个动能不是量子化的,可以取连续的值. 所以,在水平渐近线之上有一个能量为连续的区域与离散的振动能级相连接. 它类似于原子中与离散能级连接的、对应于电离的连续区.

§2.6　转动能级和转动光谱

我们先考虑纯转动(即只考虑分子在某个确定的电子态中的某个振动态中做转动运动),并暂且认为分子的转动不受振动和电子运动的影响.

理想的刚性分子的核间相对位置是固定的,振动或转动不改变这种几何构形.几何构形决定了分子转动惯量,而分子的转动特性和转动能量都决定于转动惯量. 因此我们就从刚性分子入手.

2.6.1　转动惯量　惯量张量和惯量主轴

刚性分子可以看做是刚体,刚体绕某个确定的轴的转动惯量 I 的定义是

$$I=\sum_i m_i\rho_i^2 \tag{2.6.1}$$

其中 ρ_i 是质量元 m_i 到轴的垂直距离. I 的值不仅与刚体的质量分

布有关，还与所选的转动轴有关. 由理论力学的分析知道，如果我们对给定的刚体计算通过其中的某一定点 O（通常选此点在分子质心）各个轴的转动惯量，则其中必有 3 个相互垂直的轴，对这 3 个轴的转动惯量是极大值或极小值. 这 3 个方向叫做惯量主轴，在本书中用 a,b,c 表示. 绕主轴方向的转动惯量 I_a,I_b,I_c 叫主转动惯量，用惯量主轴为坐标轴的坐标系 $O\text{-}abc$ 称为主轴坐标系，它是固定在刚体上的坐标. 在主轴坐标系中有：

$$\begin{aligned} I_a &= \sum_i (b_i^2 + c_i^2)m_i \\ I_b &= \sum_i (a_i^2 + c_i^2)m_i \\ I_c &= \sum_i (a_i^2 + b_i^2)m_i \end{aligned} \tag{2.6.2}$$

沿过主轴坐标系原点的其它任一轴 $O\xi$ 的转动惯量 I_ξ 与 I_a，I_b,I_c 的关系为

$$I_\xi=\alpha^2 I_a+\beta^2 I_b+\gamma^2 I_c \tag{2.6.3}$$

其中 α,β,γ 为 $O\xi$ 轴与 a,b,c 轴的方向余弦.

过 O 点在每一个(α,β,γ)方向上截取径矢 $R=1/\sqrt{I}$，（I 就是(2.6.3)式中的 I_ξ），则 R 的端点形成一个以 O 为中心的二次曲面，描写曲面的方程为

$$\begin{aligned} IR^2 &=(\alpha^2 I_a+\beta^2 I_b+\gamma^2 I_c)R^2 \\ &=I_a a^2+I_b b^2+I_c c^2=1 \end{aligned} \tag{2.6.4}$$

因 I_a,I_b,I_c 都大于零，所以(2.6.4)是一个椭圆面，称为此刚体在 O 点的惯量椭球，椭球的 3 个轴就是惯量主轴，而且，它的对称平面总是垂直于主轴的. 主轴方向和分子几何构形的对称性有关，可以利用分子的对称性容易地求出通过质心的某个或全部对称轴. 记住以下的事实常常是很有用的：即分子的对称轴总是主轴，并且对称平面总是垂直于主轴的.

如果分子的 $I_a\neq I_b\neq I_c$，则该分子称为不对称陀螺转子，为了

方便，通常令 $I_a>I_b>I_c$. 如果有两个主轴转动惯量相等(通常把相等的两个主转动惯量标为 I_b，而把第三个称为 I_c)，则惯量椭球是一个转动椭球，分子称为对称陀螺转子. 如果 $I_a=I_b=I_c$，则惯量椭球是一个圆球，该分子称为球对称陀螺转子. 在对称陀螺情形中(取 $I_b\equiv I_a\neq I_c$)，过 O 点垂直于 c 轴的所有方向都可作为主轴方向；在球对称情形，过 O 点的一切方向都可作为主轴方向.

对称陀螺分子中有一种特例，即 $I_a=I_b$ 而 $I_c\approx 0$，线形分子就是这种情形，此时，惯量椭球呈无穷长圆柱体形状.

下面分别讨论各种不同情形.

2.6.2 刚性线形转子

先看最简单的刚性线形转子. 天文观测中遇到的线形分子很多. 线形分子指其中各原子的核都排列在一直线(即分子轴)上，如 HCN，CO_2 等都是. 当然，双原子分子都是线形分子. 原子核的半径只有 $10^{-12}\sim10^{-13}$ cm，而分子中核间距约 10^{-8} cm，所以在很好的近似程度上可把核看成是点状的. 如果再忽略相对很轻的核外电子的质量，则绕分子轴的转动惯量可以近似认为等于零. 绕过质心垂直于分子轴的转动惯量都相同：所以此时有 $I_a=I_b$，$I_c=0$. 按经典看法，线形分子转动时，它的转动能为

$$T_{\mathrm{rot}}=\frac{1}{2}(I_a\omega_a^2+I_b\omega_b^2)=\frac{1}{2}\left(\frac{L_a^2}{I_a}+\frac{L_b^2}{I_b}\right)\qquad(2.6.5)$$

式中 ω_a,ω_b 分别是绕 a,b 轴的角速度分量，L_a,L_b 为相应的角动量. 在量子力学中，相应的哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\left(\frac{\hat{l}_a^2}{I_a}+\frac{\hat{l}_b^2}{I_b}\right)=\frac{1}{2I}(\hat{l}_a^2+\hat{l}_b^2)\qquad(2.6.6)$$

(2.6.6)式中 $I_a=I_b$，我们把它写为 I. 又因现在 $\hat{l}_c^2=0$，$\hat{l}_a^2+\hat{l}_b^2$就对应于总的转动角动量. 所以不难解出它的能量本征值为

$$E_{rot}=\frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)=hcBJ(J+1) \tag{2.6.7}$$

其中 $J=0,1,2,3\cdots$ 是转动量子数；B 是转动常数，用波数的量纲，单位是 cm^{-1}：

$$B=\frac{h}{8\pi^2 cI} \tag{2.6.8}$$

c 是光速．对一个绕通过分子质心并与分子的核间轴相垂直的轴转动的双原子分子有

$$I=\mu r_0^2 \tag{2.6.9}$$

μ 为约化质量，r_0 为核间距．

有关(2.6.6)式的推导及转动波函数可参见参考资料[4]．

根据(2.6.7)式，可以画出刚性线形转子的能级图(图 2.7)．

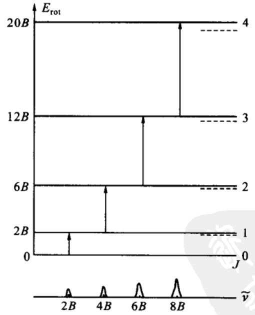


图 2.7 刚性线形转子的能级和谱线的示意图．
虚线是非刚性修正后的转动能级．E_{rot}用 cm^{-1}为单位

刚性分子的选择定则是 $\Delta J=J'-J''=\pm1$，J' 及 J'' 分别为跃迁前后的能级转动量子数．即只有 J 值相差为 ±1 的相邻能级之间的跃迁概率不为零．这些跃迁用箭头示于图中，图的下部是与每个跃迁相应的转动谱线．

2.6.3　非刚性线形转子

在 2.6.1 和 2.6.2 节中，我们假定了分子中各原子核之间的距离是固定的．实际上，核之间的耦合不是严格刚性的，分子转动时，由于惯性离心力的作用，核间距离将拉长，从而使转动惯量 I 增大，转动常数 B 值将减小，而且 B 是 J 的函数，对于较大的 J 值(即转动能量较大，转动较快的状态)B 的减小更多．可以算出(见参考资料[4]，§2.5.1)，这时用 $B(J)$ 代替 B 是很好的近似．

$$B(J)=B[1-uJ(J+1)]=B-DJ(J+1) \qquad (2.6.10)$$

u 是一个与等效势能曲线形状有关的值，一般 $u\ll1$，(2.6.10)式中的 B 等于(2.6.8)式转动惯量 I 取 $J=0$ 时的值．(2.6.10)中的 $D=Bu$ 也称为转动常数，它恒为正值，D 前面用负号(有些文献中 D 前面用正号，而 D 取负值)．用(2.6.10)式中的 $B(J)$ 代替(2.6.7)式中的 B，得出非刚性转子的转能级值为

$$E_{\mathrm{rot}}=hcBJ(J+1)-hcDJ^2(J+1)^2 \qquad (2.6.11)$$

即比相应的刚性转子能级值减小一些，J 越大，减小愈多．在图 2.7 的右边，用虚线表示出非刚性转子能级作为比较，这些虚线是把 D 值放大后夸大示出的．定量的计算(见参考资料[2]，p.78)表明，对于双原子分子，

$$D=\frac{4B^3}{\omega^2} \qquad (2.6.12)$$

其中 $\omega=\frac{1}{2\pi hc}\sqrt{\frac{k}{\mu}}$ 表示用波数为单位的振动频率．从物理上看是很清楚的，ω 越小，表示势能曲线在其极小值附近越平，因而惯性

离心力的影响越大. 由于 $\omega \gg B$,所以 $D \ll B$.

在 Born-Oppenheimer 近似中,认为转动和振动是互不影响的. 但转动和振动实际上是同时发生的,光谱的实验也证明它们有关联,应该同时考虑振动和转动. 假如振动和转动互不影响,则计算能量时只需把前面(2.5.2)式的振动能和(2.6.7)式的转动能相加,即对应每个振动能级有一组图 2.7 虚线所示的转动能级. 但更仔细的考虑发现振动对转动常数有影响. 这个问题可以用双原子分子为例说明如下:分子振动时核间距不断在变化,所以在前面对刚性分子的分析时转动常数 $B=\frac{h}{8\pi^2 c\mu r_0^2}$ 中所用的 r_0 实际上不是一个常数. 由于振动周期远小于转动周期,可以取一个振动周期中 r 的平均值 $\bar{r}$ 来代替 r_0. 这个平均值当然和振动状态(因而与振动量子数 v 的值)有关. 定性地看,当振动能增大时,由于势能曲线不是对称的抛物线,平均的原子核间距 $\bar{r}$ 将随之增大. 如果把(2.6.8)、(2.6.9)式的相当于平衡位置 r_0 的转动常数写成 B_e,即

$$B_e=\frac{h}{8\pi^2 c\mu r_0^2}$$

则相当于某个振动态的转动常数 $B_v=\frac{h}{8\pi^2 c\mu}\left[\overline{\frac{1}{r^2}}\right]$将小于 B_e $\left(因为\left(\frac{1}{r_0^2}\right)>\left(\overline{\frac{1}{r^2}}\right)\right)$. 根据较繁复的计算知道,在一级近似下,有

$$B_v=B_e-\alpha_e\left(v+\frac{1}{2}\right) \tag{2.6.13}$$

其中 α_e 是比 B_e 小得多的常数. 而转动常数 D 也应改为 D_v:

$$D_v=D_e+\beta_e\left(v+\frac{1}{2}\right) \tag{2.6.14}$$

β_e 也比 D_e 小得多,D_e 是分子完全不振动(处于平衡位置 r_0 时)的转动常数. 结果是,对于一个振动的非刚性转子,在给定的振动能级(振动量子数为 v)中,它的转动能级为

$$E_{\mathrm{rot},v}(J)=hcB_vJ(J+1)-hcD_vJ^2(J+1)^2$$
$$=hc\left[B_e-\alpha_e\left(v+\frac{1}{2}\right)\right]J(J+1)$$
$$-hc\left[D_e+\beta_e\left(v+\frac{1}{2}\right)\right]J^2(J+1)^2+\cdots \qquad (2.6.15)$$

图 2.8 给出了振动转子能级的示意图.

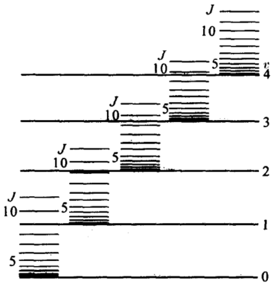


图 2.8　振动转子的能级示意图(取自参考资料[2]p.81)

当 D_v 和 α_e 都很小时,刚性转子仍可作为很好的近似,振动转子的能级仍可用

$$E_{\mathrm{rot}}=hcBJ(J+1)$$

表示. 选择定则是 $\Delta v=0,\pm1,\pm2,\cdots,\Delta J=\pm1$. $\Delta v\neq0$ 的跃迁落在红外波段.

图 2.9 中给出几个已被射电天文观测到的线形分子的转动能级的实例,它们的电子态均为$^1\Sigma$,故不必考虑电子角动量的影响. 箭头表示天文上看到的跃迁.

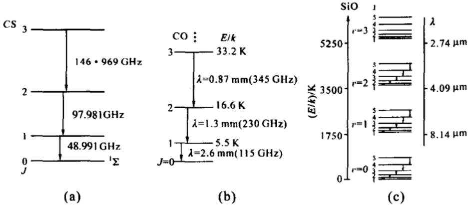


图 2.9 几个已被观测到的线形分子转动能级的例子

(a)CS 分子最低振动态($v=0$)的转动能级(取自参考资料[1],p. 192);(b)CO 分子最低振动态($v=0$)的转动能级(取自 Hollenbach D J,Thronson Jr H A(eds.)"Interstellar processes". Reidel,1987,p. 23);(c)SiO 分子的 4 个较低振动态的转动能级. $v=1$ 和 2 中的跃迁代表天体脉泽发射(取自参考资料[6],p. 112)

2.6.4 陀螺型的分子——Ⅰ. 对称陀螺

以上讨论了刚性的线形转子,并考虑非刚性以及受振动影响的修正. 刚性转子更普遍的情形是陀螺,实际分子也有不少应作为陀螺转子来考虑. 这一小节及下一小节分别讨论对称陀螺和非对称陀螺. 暂时仍不考虑电子的轨道角动量和自旋角动量,也不考虑核自旋,即认为

$$I_N = 0.$$

对称陀螺型转子是指:主转动惯量中有两个相等,惯量椭球为旋转椭球的情形. 下面我们把相等的两个主转动惯量记为 I_b,第三个转动惯量记为 I_c,如 CH_3CN 分子就是一个对称陀螺转子(参看参考资料[5],p. 20 的讨论).

对称陀螺可以分为以下 3 种情形:

(1)长椭圆对称陀螺转子(prolate top)

如果一个对称陀螺转子(分子和刚体)的 $I_b>I_c$,就称为长椭圆陀螺转子. 橄榄形的刚体就是一个实例(图 2.10(a)). 这种转子的转动惯量椭球也是长椭圆形的(因为$\frac{1}{\sqrt{I_c}}>\frac{1}{\sqrt{I_b}}$).

(2)扁椭圆对称陀螺转子(oblate top)

这种对称陀螺转子的 $I_b<I_c$,铁饼形的刚体就是一例(图 2.10(b)). 这种转子的惯量椭球也是扁椭圆形的(因为$\frac{1}{\sqrt{I_c}}<\frac{1}{\sqrt{I_b}}$).

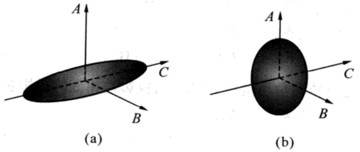


图 2.10 (a)橄榄形的刚体——长椭圆对称陀螺(prolate top);
(b)铁饼形的刚体——扁椭圆对称陀螺(oblate top)

(3)球对称陀螺转子

当 $I_b=I_c$(即 $I_a=I_b=I_c$)时,对称陀螺转子的 3 个主转动轴相等(CH_4 分子就是一例),叫做球对称陀螺转子,它的转动惯量椭球也是球形的.

球对称陀螺最为简单,它的哈密顿算符为

$$\hat{H}_{\text{rot}}=\frac{1}{2I_b}(\hat{l}_a^2+\hat{l}_b^2+\hat{l}_c^2)$$
$$=\frac{hc}{\hbar^2}B(\hat{l}_a^2+\hat{l}_b^2+\hat{l}_c^2)=\frac{Bhc}{\hbar^2}\hat{L}^2 \tag{2.6.16}$$

本征能量为

$$E_{\text{rot}}=hcBJ(J+1) \tag{2.6.17}$$

能级形状与线形转子相同.

长椭圆对称陀螺转子的哈密顿算符为

$$\hat{H}_{\rm rot}=\frac{1}{2}\left(\frac{(\hat{l}_a^2+\hat{l}_b^2)}{I_b}+\frac{\hat{l}_c^2}{I_c}\right)$$
$$=\frac{hc}{\hbar^2}[B\hat{l}_a^2+B\hat{l}_b^2+C\hat{l}_c^2]$$
$$=\frac{hc}{\hbar^2}B[\hat{l}_a^2+\hat{l}_b^2+\hat{l}_a^2+(C-B)\hat{l}_c^2]$$
$$=\frac{hc}{\hbar^2}B\hat{L}^2+\frac{hc}{\hbar^2}(C-B)\hat{l}_c^2 \qquad (2.6.18)$$

其中$C=\frac{h}{8\pi^2cI_c}$，由于$I_b>I_c$，故$C>B$，而$(C-B)$是大于零的正数，相应地转动能量本征值为

$$E_{\rm rot}=hcBJ(J+1)+hc(C-B)k_{\rm p}^2 \qquad (2.6.19)$$

这里$k_{\rm p}$是与转动角动量在C轴上的投影$\hat{l}_c$相应的投影量子数，$\hat{l}_c$的本征值为$k_{\rm p}\hbar$，$k_{\rm p}$取整数：

$$k_{\rm p}=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm J \qquad (2.6.20)$$

其中角码 p 表示 prolate 陀螺.

(2.6.19)式和(2.6.17)式相比可看出，长椭圆对称陀螺转子的能量本征值多出一项$hck_{\rm p}^2(C-B)$. $(C-B)$是正值，所以对于同一个J值有$J+1$个$|k_{\rm p}|$值不同的能级，$|k_{\rm p}|$越大时，$E_{\rm rot}$越大(见图 2.11(a)).

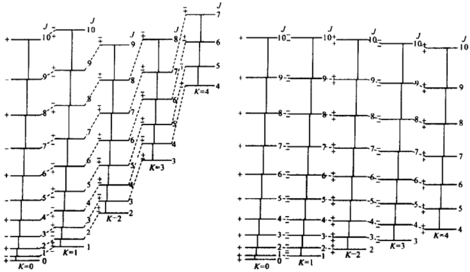
类似地，对扁椭圆对称陀螺转子有

$$\hat{H}_{\rm rot}=\frac{1}{2}\left(\frac{\hat{l}_a^2+\hat{l}_b^2}{I_b}+\frac{\hat{l}_c^2}{I_c}\right)$$
$$=\frac{hc}{\hbar^2}[B\hat{l}_a^2+B\hat{l}_b^2+B\hat{l}_c^2+(C-B)\hat{l}_c^2]$$
$$=\frac{hc}{\hbar^2}[B\hat{L}^2+(C-B)\hat{l}_c^2] \qquad (2.6.21)$$

$$E_{\rm rot}=hcBJ(J+1)+hck_{\rm o}^2(C-B) \qquad (2.6.22)$$

$$k_{\rm o}=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm J \qquad (2.6.23)$$

扁椭圆对称陀螺转子的 $I_B<I_C(B>C)$，故$(C-B)$是小于零的负数，因此，这种陀螺$|k_o|$越大时，本征值 E_{rot}越小，对每一个 J 值，也有 $J+1$ 个$|k_o|$值不同的能级(如图 2.11(b))．k_o的角码 o 表示它是 oblate 陀螺．



(a) 长椭圆对称陀螺转子能级　　(b) 扁椭圆对称陀螺转子能级

图 2.11　对称陀螺转子的能级　此图是按$|k_p|$和$|k_o|$(图中均标为 K)的值列出能级．每个能级又还有对应于$\pm|k_p|$(或$\pm|k_o|$)的二重简并．图中用＋、－表示这些简并态的对称性(取自参考资料[5]，p. 23)

在以上情形(1)和(2)中，对每一个用 J，$|k_p|$(或$|k_o|$)标志的转动能级(除 $k_p=k_o=0$ 外)都有二重简并，它们对应于$|k_p|$(或$|k_o|$)相同的两种状态(见(2.6.20)和(2.6.23)式)，即相对于对称轴旋转方向相反(因而投影值相反)的两种转动状态．

图 2.12 给出一个天文上观测到的对称陀螺分子 CH_3CN 的部分能级．

对称陀螺分子的选择定则是：当跃迁前后的电子态不改变时(微波谱线都是这种情况)，有 $\Delta J=0,\pm1$．k_p,k_o(按一些文献的习惯，也可用 K 表示)的选择定则一般为 $\Delta K=0$．此外，还有对跃迁

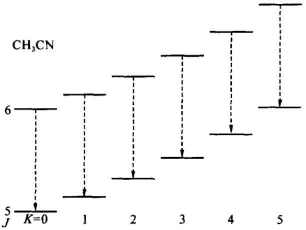


图 2.12 天文上观测到的对称陀螺分子 CN_3CN 的部分能级和 $\Delta J=\pm 1, \Delta K=0$ 的跃迁. 图中各谱线频率均在 110.35 GHz 附近. 注意,按照(2.6.22)式,所有跃迁频率都应该是 $\nu=2hcB(J+1)$ 而与 K 值无关. 但实际上,由于高次效应(参看参考资料[7],p. 77~78),K 不同的跃迁频率有很小的差别(取自参考资料[1],p. 195)

前后波函数对称性的要求,这里不详述,可参看参考资料[4],§2.10 和参考资料[7],§3.5.

2.6.5 陀螺型分子——Ⅱ. 非对称陀螺 K 型双重能级

当 $I_a \neq I_b \neq I_c$ 时,称为非对称陀螺转子,这种分子的转动能级计算起来比较复杂,而且 K(k_p 或 k_o)也不再是好量子数. 这里不介绍能级的计算,只作定性的讨论. 非对称陀螺分子情形下,K 的双重简并解除,能级是介于上节所述 prolate top 和 oblate top 的能级之间,每个 J 具有 $2J+1$ 个子能级(参看图 2.13 的中间部分). 这种能级一般采用 3 个量子数 J, k_p, k_o 来标志,其中 k_p, k_o 已失去 2.6.4 节中原有的意义. 它们只是用来表示所考虑的能级在过渡到极端情形(即 prolate top 或 oblate top)时,将和哪个能级对应. 能级符号为 J_{k_p,k_o}. 由图 2.13 中间部分的能级和两边的对称陀螺分子能级对照,可清楚地看出此点. 也有些文献中使用

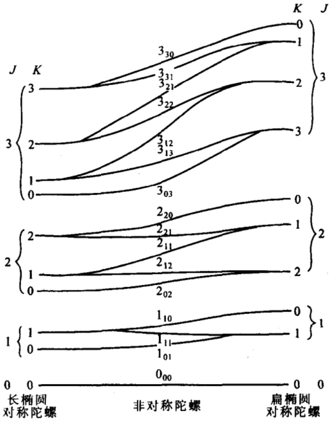


图 2.13　非对称陀螺转子能级的定性描述　此图对应于 $I_a \leqslant I_b \leqslant I_c$，即转动常数 $A \geqslant B \geqslant C$. 图的左端是 $A > B = C$ 的长椭圆对称陀螺转子能级，$E_{rot} = hcBJ(J+1)+(A-B)k_p^2$. 图的右端是 $A = B > C$ 的扁椭圆对称陀螺转子能级，$E_{rot} = hcBJ(J+1)+(C-B)k_o^2$. 中间部分对应于 B 值由 C 向 A 逐渐增加的非对称陀螺转子的能级(取自参考资料[1],p. 180)

$J_{(k_p-k_o)}$的符号. 例如 $J_{k_p,k_o}=3_{3,0},3_{3,1},3_{2,1},\cdots,3_{0,3}$的各能级在后一种符号中分别为 $J_{(k_p-k_o)}=3_{+3},3_{+2},3_{+1},\cdots,3_{-3}$.

注意，由 2.13 图可看出，非对称陀螺分子的转动能级中，同一个 J 值内，k_p，k_o 不同的一组能级互不交叉，在非对称的程度变小时，它们过渡到对称陀螺能级. 但若$(C-B)$很大，则 J 值不同的各组能级有可能互相重叠.

图 2.14(a)是水分子的转动能级的一部分,图 2.14(b)是甲醛分子的转动能级的一部分,都采用了 $J_{k_p k_o}$ 的符号.

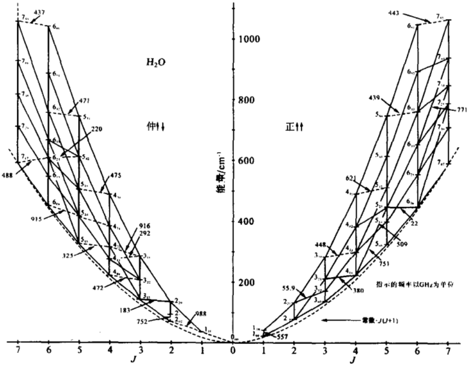


图 2.14 (a)H_2O 分子的若干低的转动能级. H_2O 是非对称陀螺转子. 其中 $6_{16}\to5_{23}$跃迁($\nu\approx22.2$ GHz)是天文上最重要的谱线之一. H_2O 的另外两个跃迁 $3_{13}\to2_{20}$($\nu\approx183.3$ GHz)和 $4_{14}\to3_{21}$($\nu\approx380$ GHz)在 20 世纪 80 年代初被检测到(取自参考资料[6],p.100)

非对称陀螺型的分子的选择定则是 $\Delta J=0,\pm1$,K 量子数的选择定则与分子的偶极距的方向有关. 但一般都允许许多种 K 跃迁(参看参考资料[7],§4.2).

由图 2.13 可见,当非对称程度减小到接近对称陀螺(长椭圆或扁椭圆,即 $I_a\approx I_b\neq I_c$)情形时,与同一个 $|K|$ 值对应的 $+|K|$,$-|K|$ 两个状态在能量上只有微小的差别. 分裂的大小常对应着微波跃迁,因此成为射电天文观测的重要对象. 这种跃迁特称为

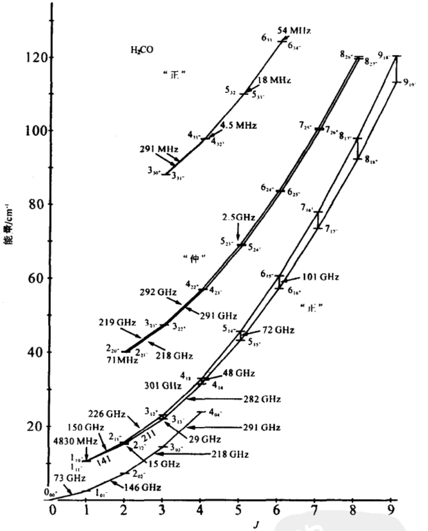


图 2.14　(b)H_2CO 分子的若干低的转动能级. H_2CO 只有轻微的非对称性，所以它同时具有 K 型双重能级跃迁（例如：$3_{12}\rightarrow 3_{13}$，29 GHz；$2_{11}\rightarrow 2_{12}$，15 GHz；$1_{10}\rightarrow 1_{11}$，4.8 GHz 等）和一般的转动跃迁（例如：$2_{11}\rightarrow 1_{10}$，150 GHz；$2_{02}\rightarrow 1_{01}$，146 GHz；$1_{01}\rightarrow 0_{00}$，73 GHz 等）（取自参考资料[6]，p.87）

K 型双重能级间的跃迁. 有些分子同时具有 K 双重能级跃迁和一般的非对称陀螺的转动跃迁（甲醛便是其一，见图 2.14(b)）. 另外

甲醇(CO_3OH)、甲酸(HCOOH)、甲酰胺(NH_2CHO)、乙醛(CH_3CHO)等多种有机分子也都观测到它们的 K 型双重能级间的跃迁.

由图 2.13 易见,接近于长椭圆情形的 K 双重能级的特点是 J 值相同,k_p 值相同,k_o 值相差为 1(图 2.14 甲醛的例子便是如此). 当然,如果是接近于扁椭圆陀螺,则 K 双重能级便是 J 值相同,k_o 值相同,而 k_p 值相差为 1. 这也就是 K 双重能级的选择定则.

图 2.15 是甲酸(HCOOH)的一个 K 双重能级,箭头所示是天文上观测到的跃迁.

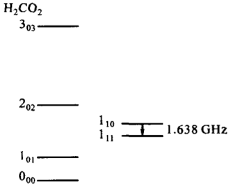


图 2.15 甲酸(HCOOH)分子的 K 双重能级间的跃迁(取自参考资料[1],p. 197)

§ 2.7 电子角动量和转动角动量的耦合

在整个 § 2.6 节中,讨论转动能级时都没有考虑电子的总轨道角动量和总自旋角动量以及核自旋 I_N 的影响. 如果我们限于讨论 $\Lambda=0, S=0$ 的 $^1\Sigma$ 电子态,并认为核自旋 $I_N=0$ 的这种情况,不考虑这些影响是可以的. 但实际上电子态不一定都是 $^1\Sigma$ 态,I_N 也

不一定等于零,因此需要讨论电子的总角动量与转动角动量以及核自旋角动量之间的耦合问题. 电子角动量对转动能级的影响较大,它使能级变得复杂. 本节中按几种情况分别处理这个问题,核自旋角动量对能级的影响是造成超精细结构,放在后面的章节中讨论. 为了简单,我们仍以双原子分子为例. 先用刚性分子模型,必要时再加上非刚性修正.

2.7.1　双原子分子情形

在§2.6中把双原子分子看成$I_a=I_b, I_c=0$的陀螺. 这里的转动惯量只是对分子中的原子核而言,至于电子所产生的转动惯量则没有加以考虑,因为电子的质量微小,所以它绕分子轴的转动惯量远小于核的转动惯量,可认为接近于零. 但是,电子绕轴的转动速度比核的转动速度快得多,产生的轨道角动量在某些状态下,可以与核的转动角动量同数量级. 当分子处于电子总轨道角动量$\boldsymbol{L}$不为零的电子状态时,就不能忽略电子总轨道角动量的影响. 电子总自旋角动量$\boldsymbol{S}$的大小与轨道角动量同数量级,故当总自旋量子数S不为零时也应同时考虑.

我们先考察$S=0$的电子态,这可使问题简单一些,这时电子总轨道动量$\boldsymbol{L}$在分子轴方向上的分量Λ和核的转动角动量$\boldsymbol{R}$($\boldsymbol{R}$即分子中由各个核组成的"构架"绕分子质心转动的转动角动量,以下同.)将耦合成分子的总角动量$\boldsymbol{J}$. 图2.16示出这个情况. 由量子力学计算得出,此时只有$\boldsymbol{J}$和$\boldsymbol{J}$在分子对称轴上的投影Λ是守恒量(运动常数). 相应的量子数J和Λ是好量子数,而核的转动角动量$\boldsymbol{R}$不对应好量子数,也就是说,$\boldsymbol{R}$在计算转动能级中不起什么作用. 由严格的波动方程分析得出这种双原子分子的转动能量为

$$E_{\rm rot}=[BJ(J+1)+(C-B)\Lambda^2]hc \tag{2.7.1}$$

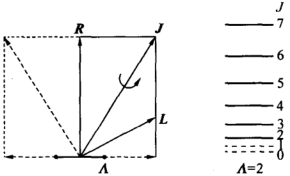


图 2.16 电子总自旋 $S=0$ 时，电子轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 在分子轴方向的投影 $\boldsymbol{\Lambda}$ 与分子的核的转动角动量 $\boldsymbol{R}$ 耦合成为分子的总角动量 $\boldsymbol{J}$. 虚线部分表示 $\boldsymbol{\Lambda}$ 方向相反（即电子轨道运动方向相反）时的耦合情况. 右边为 $\Lambda=2$ 时的转动能级图，$J<2$ 的能级不存在.（取自参考资料[2]，p.87）

其中 $B=\dfrac{h}{8\pi^2 cI_b}$，$C=\dfrac{h}{8\pi^2 cI_c}$，I_c 来自电子对原子核间轴的转动惯量，I_c 很小，所以常数 $C\gg B$. 由图 2.16 看出，$\boldsymbol{J}$ 总大于 $\boldsymbol{\Lambda}$，所以量子数 J 总大于 Λ，对给定的 Λ，

$$J=\Lambda,\Lambda+1,\Lambda+2,\Lambda+3\cdots \tag{2.7.2}$$

注意，即使 $J=\Lambda$ 时，$\boldsymbol{J}$ 也不和 $\boldsymbol{\Lambda}$ 重合，原因是由于

$$|\boldsymbol{\Lambda}|=\Lambda\hbar \tag{2.7.3}$$

而

$$|\boldsymbol{J}|=\sqrt{J(J+1)}\hbar \tag{2.7.4}$$

对一个给定的电子态，Λ 是一个常数（见 §2.3），所以在（2.7.1）式中，Λ^2 项对分子能级的影响只是使（对同一电子态而言）各转动能级比简单转子增加了一项相同的常数，这对于转动谱线（由能级差决定）值并无影响. Λ 对能级的影响表现在它使 J 值不同于只有转动角动量 $\boldsymbol{R}$ 时的数值：由（2.7.2）式看出，$J<\Lambda$ 的能级不存在. 譬如对 $\Lambda=2$ 的电子态，就不存在 $J=0$，$J=1$ 的转动能级，转动能级从量子数 $J=2$ 开始.

最后，如果考虑到双原子分子不是刚性的，并受到振动影响，

则与§2.6相似，应该把能级修正为

$$E_{\mathrm{rot},v}=[B_vJ(J+1)+(C-B_v)\Lambda^2-D_vJ^2(J+1)^2+\cdots]hc \tag{2.7.5}$$

这方面不再详述.

2.7.2 几种洪德耦合情形

由上小节最简单的例子看出，如果分子中电子总轨道角动量不等于零，则计算转动能量时，核的转动角动量 $\boldsymbol{R}$ 不是好量子数，必须考虑电子总轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 和核转动角动量之间的耦合，耦合后的分子总角动量 $\boldsymbol{J}$ 才是运动常数，可以作为好量子数. 这种角动量耦合方法可以推广到更普遍的情形.

在更普遍的情形中，分子处于电子总轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 与电子总自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 都不等于零的电子态中，如果不考虑核自旋角动量 $\boldsymbol{I}_{\mathrm{N}}$ 的话，则分子的总角动量 $\boldsymbol{J}$ 由 $\boldsymbol{L}$,$\boldsymbol{S}$ 和核的转动角动量 $\boldsymbol{R}$ 组成. 我们仍以双原子为例，总角动量为

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}+\boldsymbol{R} \tag{2.7.6}$$

故

$$\boldsymbol{R}=(\boldsymbol{J}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{S}) \tag{2.7.7}$$

在§2.6中，我们假定了 $\boldsymbol{L}=0$,$\boldsymbol{S}=0$，在这种情形下，分子的总角动量就是核转动的角动量，即(2.7.7)式中 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{J}$(注：在§2.6中，我们把核转动角动量 $\boldsymbol{R}$ 写为 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{l}_a+\boldsymbol{l}_b+\boldsymbol{l}_c$,$\boldsymbol{L}$ 就是本节中的 $\boldsymbol{R}$)，因此那时得到(2.6.16)式：

$$\hat{H}_{\mathrm{rot}}=\frac{hcB}{\hbar^2}\hat{L}^2 \tag{2.6.16}$$

而在现在的情况下，应该用(2.7.7)式中的 $\boldsymbol{R}$ 代替(2.6.16)式中的 $\boldsymbol{L}$，即分子中的核转动的哈密顿量为

$$\hat{H}_{\mathrm{rot}}=\frac{B}{\hbar^2}\hat{R}^2=\frac{Bhc}{\hbar^2}(\hat{J}-\hat{L}-\hat{S})^2$$

$$= \frac{hcB}{\hbar^2}(\hat{J}^2 + \hat{L}^2 + \hat{S}^2 - 2\hat{J}\cdot\hat{L} - 2\hat{J}\cdot\hat{S} + 2\hat{L}\cdot\hat{S}) \tag{2.7.8}$$

原则上用这个哈密顿算符求能量本征值即能得到转动能量. 但由于出现交叉项 $\hat{J}\cdot\hat{L}$,$\hat{J}\cdot\hat{S}$ 和 $\hat{L}\cdot\hat{S}$(这些交叉项反映角动量间的相互作用,或者叫做角动量之间的耦合),故其结果将依赖于各交叉项的相互作用强度以及 $\hat{L}$,$\hat{S}$,$\hat{J}$ 与分子轴方向电场相互作用的强度. 计算变得很困难,而且一般不能得到适于描述能级的好量子数.

解决这个问题的办法是先在各种可能的耦合方式中考虑几种极端情形,即假定某种相互作用特别强,其它的可视为次要因素,此时可以得到"近似好"的量子数,然后再把剩下的较小的相互作用作为微扰处理,这种方法是解决复杂分子能级问题时常用的一个办法,而且各种极端情形的物理图像也比较清楚. 我们着重介绍其中最常见也是最重要的洪德(a),(b)两种情形,其它情形可参阅参考资料[2]及[7].

(1)洪德情形(a)

这种耦合方式的物理模型如下:核的转动($\boldsymbol{R}$)与电子运动(包括电子自旋运动($\boldsymbol{S}$)和轨道运动($\boldsymbol{L}$)) 之间的相互作用弱,而电子的总自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 和总轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 都很强地耦合到连接原子核的轴线方向(场强方向)(图 2.17). 结果,与 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 的投影相对应的量子数 Λ 和 Σ 成为好量子数(这反映出 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{S}}$ 是快速绕轴运动的),与环绕核间轴的电子总角动量投影 $\boldsymbol{\Omega}$ 相对应的角动量量子数 Ω 也是好量子数,$\boldsymbol{\Omega}$ 和核转动的角动量 $\boldsymbol{R}$(严格说来,$\boldsymbol{R}$ 已经不恰好是核的转动角动量,后面讨论 Λ 双重态问题时再仔细推敲这一点)耦合成总角动量 $\boldsymbol{J}$,这类似于图 2.16 的情况,不同的只是现在用 Ω 代替了 Λ.

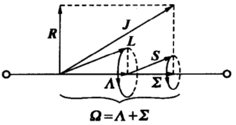


图 2.17　洪德情形(a)的矢量图

在洪德情形(a)中，转动能量的公式将和(2.7.1)式类似，只需把其中的 Λ 改为 Ω

$$E_{rot}=[BJ(J+1)+(C-B)\Omega^2]hc$$
$$=[BJ(J+1)-B\Omega^2+C\Omega^2]hc$$

通常略去 $C\Omega^2$ 一项而把转动能写为

$$E_{rot}=hcB[J(J+1)-\Omega^2] \tag{2.7.9}$$

因为 $C\Omega^2$ 项对给定的电子态是固定的值，可以包括在电子能量之中，所以在(2.7.9)式中把它略去了.

对于非刚性的对称陀螺，如果考虑离心力的影响，则(2.7.9)式中还应加上 $-DJ^2(J+1)^2$ 一项. 如果考虑振动对转动的影响，则 B，D 均应用 B_v，D_v 代替. 通常可以忽略离心伸长项 D_v，而只保留 B_v 项，此时(2.7.9)式变为

$$E_{rot}=hcB_v[J(J+1)-\Omega^2] \tag{2.7.10}$$

Ω 可以是整数(当电子数目为偶数值时)也可以是半整数(当电子数目为奇数时)，由于 Ω 是 J 的投影，所以 Ω 为整数时，J 也得是整数，Ω 为半整数时，J 也为半整数，而 J 永远大于(或等于) Ω，$J<\Omega$ 的能级是不存在的. 对于一个给定的 Ω，有

$$J=\Omega,\Omega+1,\Omega+2\cdots \tag{2.7.11}$$

在§2.3中讲过，由于自旋-轨道耦合，所以同一电子态 ${}^{2S+1}\Lambda_{\Lambda+\Sigma}$ 分裂为 $2S+1$ 个多重能级(相当于原子的精细结构能级)，不同的 $\Lambda+\Sigma$ 值相应于不同的能级，这是因为(2.7.8)式中 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 一项贡献

了能量，这能量大小为 $\lambda\Lambda\Sigma$. 对同一个 Λ,Σ 值不同时（也即 $\Lambda+\Sigma$ 值不同时）能量不同. λ 由电子态的特性决定，反映自旋-轨道耦合的强弱，实际分子中自旋-轨道耦合能与转动能的大小可比，所以造成转动能级的重叠. 图 2.18 给出电子态为$^2\Pi$（即 $\Lambda=1,S=\frac{1}{2}$）和$^3\Delta$（$\Lambda=2,S=1$）的例子.

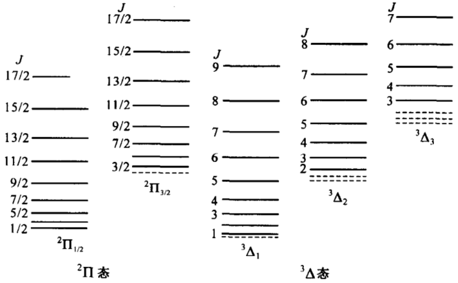


图 2.18 洪德情形(a)中的一个$^2\Pi$ 态与一个$^3\Delta$ 态的头几个转动能级. 因为 J 必须$\geqslant\Omega$，虚线表示的那些能级并不存在，这里略去了 Λ 型双重分裂.（取自参考资料[2]，p. 169）

洪德情形(a)中，选择定则是 $\Delta J=0,\pm1,\Delta\Omega=0,\pm1$，但一般 $\Delta\Omega=\pm1$ 跃迁都超出微波范围，观测到的微波谱线都是 $\Delta\Omega=O$ 的跃迁.

(2)洪德情形(b)

在 § 2.3 以及洪德情形(a)中都提到了电子自旋-轨道耦合，这是一种磁相互作用，它是通过电子轨道运动所产生的轴向磁场与自旋作用而造成的. 如果 **S** 与轴向磁场不耦合（或者耦合较弱），

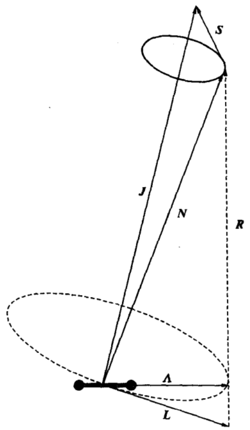


图 2.19　洪德情形(b)的矢量图.
虚线椭圆所代表的图形轴的章动比实线椭圆所代表的 $\boldsymbol{N}$ 与 $\boldsymbol{S}$ 绕 $\boldsymbol{J}$ 的进动快得多. 当 $\Lambda=0$ 时,$\boldsymbol{N}(\equiv\boldsymbol{R})$是垂直于核间轴的.(取自参考资料[2],p.170)

则 $\boldsymbol{S}$ 在原子核间轴上的投影失去意义,Σ 不再是好量子数,当然 Ω 也失去意义,此时就不能再像洪德情形(a)那样引用量子数 Ω.

作为例子,可以举 $\Lambda=0$ 的电子态,此种情况下,显然没有轴向磁场,$\boldsymbol{S}$ 与轴的耦合也就肯定不存在. 另外还有一些分子,特别是一些轻分子,即使 $\Lambda\neq0$ 时 ,$\boldsymbol{S}$ 与轴的耦合也极微弱,我们把 $\boldsymbol{S}$ 与原子核间轴耦合很弱或不耦合而与 $\boldsymbol{N}=\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{R}$ 耦合的情形,($\boldsymbol{L}$ 和轴的耦合仍很强)称为洪德情形(b).

在洪德情形(b)中各角动量耦合的模型示于图 2.19.

从图 2.19 可见,在洪德情形(b)中,$\boldsymbol{L}$ 仍是快速的绕原子核间轴进动,它的投影为 $\Lambda\hbar$,Λ 仍是好量子数. $\boldsymbol{\Lambda}$ 与核转动角动量 $\boldsymbol{R}$ 耦合为 $\boldsymbol{N}$,$\boldsymbol{N}$ 是除电子自旋角动量外的总角动量,它在轴上的投影也是 $\Lambda\hbar$,与 $\boldsymbol{N}$ 相应的量子数 N 是好量子数,N 的取值总是等于和大于 Λ:

$$N=\Lambda,\Lambda+1,\Lambda+2,\cdots \qquad (2.7.12)$$

当 $\Lambda=0$ 时,N 取 0,1,2…等整数值.

$\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{N}$ 由磁相互作用耦合成 $\boldsymbol{J}$. 总的效果是 $\boldsymbol{N}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 绕 $\boldsymbol{J}$ 进动,

$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{N}+\boldsymbol{S}$ 是分子的总角动量(以上均假定核自旋角动量 I_N 为零).对给定的 N,$\boldsymbol{J}$ 的量子数 J 可取以下 $2S+1$ 个值($N<S$ 时除外):

$$J=N+S,N+S-1,\cdots,|N-S| \qquad (2.7.13)$$

就是说,对给定的 N,能级还有 $2S+1$ 层多重结构.

分子转动能由图 2.19 中 $R^2=N^2-\Lambda^2$ 的关系可得

$$E_{\mathrm{rot}}=hcB[N(N+1)-\Lambda^2]+\gamma\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{N} \qquad (2.7.14)$$

$\gamma\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{N}$ 一项是由于 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{N}$ 的较弱的磁相互作用造成的能级的小的分裂,即 N 值相同而 J 值不同的状态能量稍有不同,N 越大这种分裂也越大. 图 2.20 示出最重要的两种情况,即$^2\Sigma$ 态和$^3\Sigma$ 态在洪德情形(b)中的转动能级图,由于系数 γ(它反映磁相互作用的大小)值很小,所以分裂不大. 由于 Σ 态的 $\Lambda=0$,所以对 $N=0$ 的最低一个转动级有 $J\equiv S$,按(2.7.13)式,此时只有一个 J 出现.

可以证明(参看参考资料[3],p.194 及参考资料[7],p.171),对$^2\Sigma$ 态,转动能量可写为:

$$\begin{cases} E_{\mathrm{rot}}=hc[B_vN(N+1)+\frac{1}{2}\gamma N] & (J=N+\frac{1}{2}) \\ E_{\mathrm{rot}}=hc[B_vN(N+1)-\frac{1}{2}\gamma(N+1)] & (J=N-\frac{1}{2}) \end{cases} \qquad (2.7.15)$$

洪德情形(b)的选择定则是 $\Delta N=\pm1,\Delta J=0,\pm1$.

(3)洪德情形(c)

某些分子(特别是重分子)中,$\boldsymbol{L}$ 与 $\boldsymbol{S}$ 之间的相互作用比它们与核间轴的相互作用更强,此时,Λ 和 Σ 均无意义,$\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 将先组成合矢量 $\boldsymbol{J}_e$(电子的总角动量),$\boldsymbol{J}_e$ 在核间轴上的分量 $\boldsymbol{\Omega}$ 再和分子转动的角动量 $\boldsymbol{R}$ 耦合成总角动量 $\boldsymbol{J}$(图 2.21),其能级公式与(2.7.9)式相同.

(4)洪德情形(d)

$\boldsymbol{L}$ 与核间轴的耦合很弱,而与 $\boldsymbol{R}$ 的耦合则很强. 在图 2.22 中

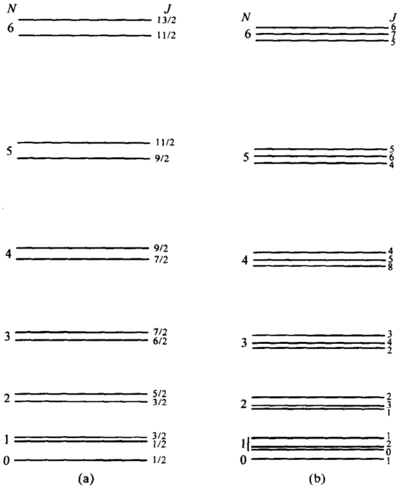


图 2.20　洪德情形(b)中$^2\Sigma$态的头几个转动能级(a)和$^3\Sigma$态的头几个转动能级(b). 必须指出,在$^3\Sigma$态的情形中,对于一个给定的N值,这些能级的位置并不是依照它们的J值的次序排列的. 图中的双重裂距与三重裂距,和N值不同的各个能级的间距相比,是以大得多的比例尺画出来的(取自参考资料[2],p. 171)

示出,$\boldsymbol{L}$与$\boldsymbol{R}$耦合成$\boldsymbol{N}$,$\boldsymbol{N}$再与$\boldsymbol{S}$耦合成总角动量$\boldsymbol{J}$. 但通常$\boldsymbol{N}$与$\boldsymbol{S}$耦合极弱,$\boldsymbol{S}$与$\boldsymbol{J}$都可以忽略不计,只用$\boldsymbol{N}$便可以. 此时$\boldsymbol{R}$是很好地量子化的:$|\boldsymbol{R}|=\sqrt{R(R+1)}\hbar$. 在一级近似下,转动能为

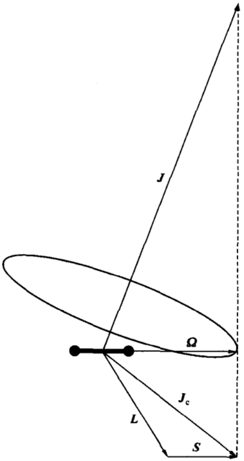


图 2.21 洪德情形(c)的矢量图. L 与 S 绕 J_c 的进动和 J_c 绕原子核连线的进动,在图中都没有画出(取自参考资料[2],p.173)

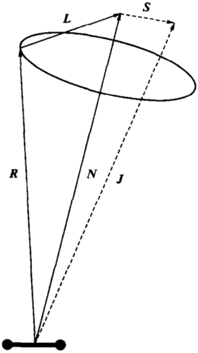


图 2.22 洪德情形(d)的矢量图. 图中用虚线画出 N 与 S 相加成为 J 的情况,因为实际上并不重要(取自参考资料[2],p.173,略有改动)

$$E_{\text{rot}}=hcB_vR(R+1) \tag{2.7.16}$$

每一个 R 对应一个一级近似的转动能量. R 取值为 0,1,2,…. 此公式所给出的每个能级都分裂成若干个由 N 标志的子能级,N 的取值为

$$N=R+L,R+L-1,\cdots,|R-L| \tag{2.7.17}$$

当 $R \geqslant L$ 时，每个 R 有 $2L+1$ 个不同的 N. 能级图见图 2.23 的右边部分.（严格地讲，每个由 N 确定的子能级还要进一步分裂成 $2S+1$ 个更小的能级.）

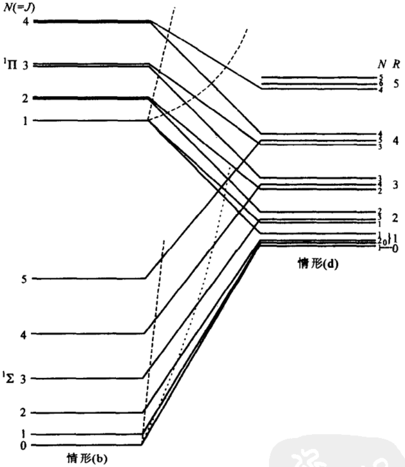


图 2.23　右边为洪德情形(d)的能级图（以 $L=1$ 的情况为例）. 图的左边示出相应的洪德情形(b)的能级图. 中间部分是由洪德情形(b)向洪德情形(d)过渡的状况（L 与核间轴的相互作用强度从左向右逐渐减小）（取自参考资料[2], p. 177）

2.7.3 脱耦现象 Λ 型双重能级

1. 自旋脱耦,洪德情形(a)到(b)的过渡

洪德情形(a)、(b)、(c)、(d)都只代表理想化的极端情形,它在一定的近似程度内可以反映某些电子(自旋及轨道)角动量不为零的分子的转动能级.但更普遍的是在各极端之间的过渡情形,即所谓不耦合情形,这时能级变得复杂,前述的一些好量子数也失去意义.作为一个例子,我们示出$^2\Pi$电子态的转动能级由洪德情形(a)过渡到洪德情形(b)时的情形(图 2.24).对于$^2\Pi$态($S=\frac{1}{2}$,$\Lambda=1$),在洪德情形(a)时,因为$\Omega=\Lambda+M_S$,Ω取$1+\frac{1}{2}=\frac{3}{2}$和$1-\frac{1}{2}=\frac{1}{2}$两个值,而按洪德情形(a)中所述,$J=\Omega,\Omega+1,\Omega+2,\cdots$,故对$^2\Pi_{\frac{1}{2}}$有$J=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\cdots$而对$^2\Pi_{\frac{3}{2}}$有$J=\frac{3}{2},\frac{5}{2},\frac{7}{2},\cdots$等等.结果能级如图 2.24 的左边所示,它和图 2.18(a)相同.

当$^2\Pi$态在洪德情形(b)时,由于$\boldsymbol{N}=\boldsymbol{R}+\boldsymbol{\Lambda}$,而$\Lambda=1$,故根据(2.7.12)式$N$的取值为$N=1,2,3,\cdots$.而对于每个确定的$N$,$J$的取值为(按(2.7.13)式)

$$J=\begin{cases}N+\frac{1}{2}\\[2mm] N-\frac{1}{2}\end{cases}$$

结果能级如图 2.24 中间所示(类似于图 2.20(a)).

在洪德情形(a)中,电子的轨道运动及自旋运动都与核间轴耦合得很强,使得矢量Ω有确定意义.也就是说$\boldsymbol{\Lambda}$与$\boldsymbol{\Sigma}$之间有强耦合,而后Ω再与核转动角动量$\boldsymbol{R}$耦合成$\boldsymbol{J}$.而在洪德情形(b)中,电子自旋与核间轴耦合很弱,它与核间轴脱耦而与$\boldsymbol{N}$($\boldsymbol{\Lambda}$与$\boldsymbol{R}$的合矢量)形成强耦合组成总角动量$\boldsymbol{J}$.介于洪德情形(a)和洪德情形(b)

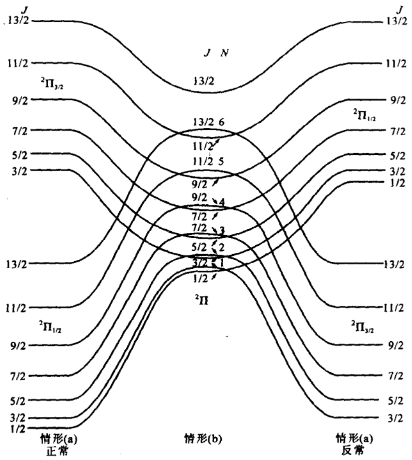


图 2.24　由洪德情形(a)向洪德情形(b)过渡的能级示意图
(取自参考资料[7],p. 187)

两种极端耦合情形之间是过渡的耦合情形，叫做自旋脱耦. 我们把过渡的能级示于两者中间. (图 2.24 右边也是洪德情形(a)的能级，不过它的自旋-轨道作用常数($AS \cdot \Lambda$ 中的 A)是负值. (详见参考资料[7],p. 186)

天文观测到的分子中，OH、CN 分子的能级都是介于洪德情形(a)和洪德情形(b)之间的. 但 OH 较靠近洪德情形(a),CN 较靠近洪德情形(b). 这两种分子都有原子核自旋造成的超精细结

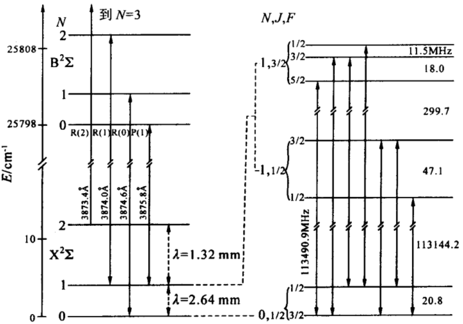
构(有关超精细结构的问题见§2.8). 由于 OH 还有 Λ-双重态的分裂,它的能级将在下一小段中给出. 这里我们先给出 CN 的能级图(图 2.25).

2. L 脱耦,Λ 双重能级,情形(a)、(b)到(d)的过渡

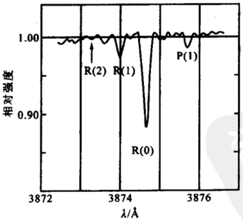
Λ 型双重能级(Λ-type doubling 或 Λ-doublets)是星际分子微波谱观测中一种重要的能级,因为有些分子(例如第一个在微波波段观测到的星际分子 OH 和 CH 分子)的$^2\Pi$ 态中的 Λ 型双重能级间的跃迁频率都正好在微波波段.

§2.3 节里曾说过:在分子中电子轨道角动量 L 沿分子内部电场空间量子化,其投影取 $M_L=L,L-1,L-2,\cdots,0,\cdots,-L+1,-L$ 各值,并且 $|M_L|$ 相同的状态能量相同,因此可以用 $\Lambda=|M_L|$ 来表示能级,Λ 取 $0,1,2,\cdots,L,\cdots$,共 $L+1$ 个正值. 可见,即使其它各种因素造成的简并都不考虑,对于 $\Lambda\neq 0$ 的任一个能级至少也还要包含二重简并,即包含 $|M_L|$ 相同而 M_L 的正负号不同的两种运动状态. 在以前所有的讨论中,一直认为这种双重简并没有解除. 但事实上,在一定条件下,这种双重简并将被解除,每个原来用 J 量子数标志的能级将分裂为两个能级. 一般情形下,这两个能级的间隔小于转动能量和精细结构能量,但在微波测量中仍是可以精确地量出的,称为 Λ 型双重能级.

下面简单说明简并解除的原因. 它是由核的转动角动量 $\boldsymbol{R}$ 与电子轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 之间的相互作用引起的,在讨论洪德情形(a)和(b)时,我们都忽略了这个相互作用. 那时,我们集中注意于(a)、(b)两种极端条件下,$\boldsymbol{R},\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{S}$ 之间,以及它们和分子轴之间,如何以不同的方式构成总角动量 $\boldsymbol{J}$,其中 $\boldsymbol{L}$ 都是很强地耦合到分子轴上,以致只有 Λ 是有意义的. 这种理想的极限情形能以很好的近似反映观测到的能级和谱线. 但实际分子都往往是处于各种极限情形之间的过渡情形. 现在讨论 Λ 双重能级,就必须把在极限情形下忽略掉的 $\boldsymbol{L}$ 与 $\boldsymbol{R}$ 的作用加以考虑.



(a)基电子态 $X^2\Sigma$ 和第一激发电子态 $B^2\Sigma$ 的最低几个转动能级(接近洪德情形(b). 图中标出了若干光学跃迁. 图右边是把 $X^2\Sigma$ 态的 $N=0$ 和 1 的能级放大,示出精细结构(J)和超精细结构(F)以及它们之间的毫米波跃迁.



(b)1940 年 W. S. Admas 在蛇夫座ζ星方向观测到的 CN 的星际光学吸收线

图 2.25　CN 分子的能级图(取自参考资料[6],p. 51. 原(a)图有误,已修改)

Λ-双重能级是对 L 与分子轴耦合的解耦，是介于洪德情形(a)或(b)和洪德情形(d)之间的过渡情形．这种过渡使同一个 Λ 中，M_L 不同的两个状态间产生微小的能级分裂 ΔE，定量的计算 ΔE 是很繁复的(参见参考资料[7]，§7.5)，对 $S=0$，$\Lambda=1$ 的情形(即 $^1\Pi$ 态)，结果有如下形式：

$$\Delta E = q_\Lambda J(J+1) \tag{2.7.18}$$

ΔE 为原来简并的能级的分裂，即 Λ 型双重能级间的能量间隔，q_Λ 的计算很复杂．可以看出，ΔE 将随转动的增大(即 J 增大)而增大．图 2.23 定性地表示出由情形(b)向情形(d)过渡的状况．

另外，需要指出一点：与分裂后的两个能极相对应的，并不是 $+\Lambda$ 态和 $-\Lambda$ 态，而是它们的线性组合．

在星际分子中，谱线属于 Λ 型双重能级的分子有 OH 和 CH. OH 的基电子态为 $^2\Pi_{\frac{3}{2}}$ 和 $^2\Pi_{\frac{1}{2}}$，即 $\Lambda=1, S=\frac{1}{2}, \Lambda+\Sigma=\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$.

OH 的 Λ 和 S 都不为零，所以在考虑 Λ 型双重性之前，先要考虑电子角动量和转动角动量的耦合问题(§2.7)．实际上，OH 是介于洪德情形(a)和洪德情形(b)之间的过渡情形(参阅图 2.24)，但更接近情形(a)．所以我们可以用总角动量 $J(J\geqslant\Omega)$ 来标记能级，于是 $^2\Pi_{\frac{3}{2}}$ 态有 $J=\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \cdots$，$^2\Pi_{\frac{1}{2}}$ 态有 $J=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$，…等各转动能级．OH 分子的特点在于每个转动能级的 $\pm\Lambda$ 简并又被解除，成为 Λ 双重能级(图 2.26)．除此之外，由于 H 原子的原子核具有固有核自旋角动量，所以 OH 的能级还有超精细结构，这一点放在下一节介绍．

Λ 双重能级中，一个能级的波函数是对称的(用"+"表示)，另

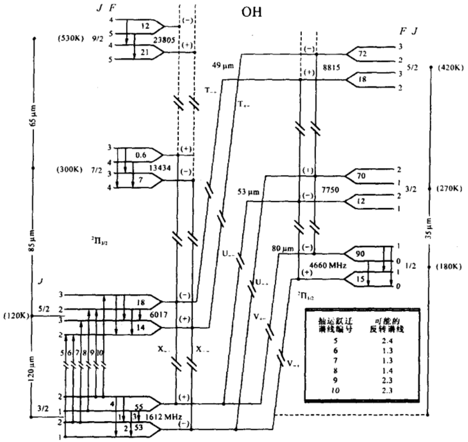


图 2.26　OH 分子基电子态$^2\Pi_{3/2}$和$^2\Pi_{1/2}$的能级结构　其中每个用 J 标志的转动能级分裂为 Λ 双重能级，用“+”“−”表示．进一步的分裂为用 F 标志的超精细分裂能级．向下的箭头表示天文上已观测到的跃迁，向上的箭头表示可能造成的某种粒子数反转的红外（～122 μm）抽运（取自参考资料[6]，p.80）

一个能级的波函数是反对称的（用“−”表示），这两种对称性之间的跃迁总是允许的．

§2.8　分子的超精细结构能级和谱线

在这一节中，要考虑以前各节中予以忽略的原子核自旋 $\boldsymbol{I}_N$ 对能级的影响. 这种影响类似于原子光谱中的情形，其结果是造成能级的超精细结构. 这种能级我们在图 2.25(CN)和图 2.26(OH)中已经遇到过了.

超精细结构的物理图像是核自旋磁矩 μ_N(它的大小与核自旋角动量 $\boldsymbol{I}_N$ 成正比)与不等于零的电子轨道磁矩 μ_L 及电子自旋磁矩之间的磁相互作用，这种磁相互作用可以看成是核自旋角动量 $\boldsymbol{I}_N$ 在 $\boldsymbol{L}$ 及 $\boldsymbol{S}$ 所产生的磁场中发生量子化的空间取向，不同的相对取向对应着不同的磁相互作用能，结果使原来(未考虑核自旋时)的能级分裂为若干个能级，每个子能级代表一种相对取向. 这种微小的能级分裂就叫做能级的超精细结构，它使原来的每一条谱线也产生相应的超精细结构.

对于$^1\Sigma$ 态(大多数分子的基态是$^1\Sigma$ 态)，各个电子的轨道角动量和自旋角动量(因而相应的磁矩 μ_L 和 μ_S)都因成对而相互抵消，$\Lambda=S=0$，它们在原子核上的总磁场等于零，所以分子只有由于其它原因(分子的转动或其它核的自旋)所产生的极微弱的磁场作用在核自旋上. 这种情况下超精细分裂只有几个 kHz 的数量级，不易分辨. 但对于其它的的电子态(例如 OH 的$^2\Pi_{\frac{3}{2}}$态，CN 的$^2\Sigma$ 态)，超精细结构可以产生几十 MHz 的分裂，这是我们感兴趣的.

处理超精细结构的办法仍是用角动量耦合，虽然存在着几种可能的耦合方式，但实际上，极大多数情形都可以用 $\boldsymbol{I}_N$ 和 $\boldsymbol{J}$ 的耦合来形成分子的总角动量 $\boldsymbol{F}$，$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{I}_N+\boldsymbol{J}$. 其中 $\boldsymbol{J}$ 就是在§2.7 中讨论过的，由电子的自旋角动量 $\boldsymbol{S}$，轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 加上分子转动的角动量 $\boldsymbol{R}$ 耦合而成的(除了核自旋以外的)合角动量.

超精细结构的每个子能级用量子数 F 来表示，F 的值取 $J+I$

和$|J-I|$之间相隔为1的整数或半整数. I为核自旋量子数. 当$J>I$时,共形成$2I+1$个子能级;而$J<I$时,共形成$2J+1$个子能级. 在OH分子中I是H原子核的自旋量子数,等于1/2. 在CN分子中I是^{14}N原子核的自旋量子数,它等于1(参阅图2.25、图2.26),各种原子及其同位素的核自旋值可查阅参考资料[7]p.644～648,附录Ⅶ. 不同的同位素分子的核,核自旋值不同,所以利用超精细结构可以容易地区别和判定同位素分子的谱线.

定量计算超精细结构的间隔一般情况下是在哈密顿量中加上$\hat{H}_{\mathrm{hfs}}=A\boldsymbol{I}_{\mathrm{N}}\cdot\boldsymbol{J}$一项,用微扰方法求得.

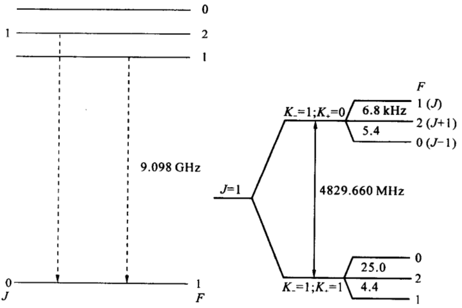
针对具体的电子状态和耦合方式,可从理论上算出A的值,例如对洪德情形(a),计算得到

$$A=[a\Lambda+(b+c)\Sigma]\frac{\Omega}{J(J+1)}$$

其中a,b,c分别是反映核与电子轨道角动量相互作用,核与电子自旋角动量的张量相互作用,核与自旋角动量标量相互作用大小的量(参看参考资料[1],p.183或[7],第8章),这些不在这里详细介绍. F的选择定则是$\Delta F=0,\pm1$.

图2.27给出了两个天文上观测到的在分子的转动能级上叠加了超精细结构能级的例子. 其中HC_3N的超精细结构来自^{14}N核($I=1$),箭头所示的跃迁对应观测到的谱线. H_2CO的超精细结构来自两个氢核的合核自旋,图中所示是转动能级$1_{10}-1_{11}$(参看图2.14)跃迁的超精细结构.

除了$I=0$和$I=\frac{1}{2}$的核(它们的波函数有球对称性)以外,许多原子核,除了磁偶极矩外还具有电四极矩,电四极矩的轴相对于$\boldsymbol{J}$取向不同时,静电相互作用能不同,它对超精细结构的裂距会产生影响.



(a)线形分子 HC_3N 转动能级的超精细结构(取自参考资料[1],p.194)

(b)非对称陀螺分子 H_2CO 转动能级 $1_{10}\rightarrow 1_{11}$ 的超精细结构能级. 它们之间的6个允许的跃迁已经在天文谱线中观测到(取自参考资料[6],p.91 页)

图 2.27 分子能级的超精细结构

§2.9 反演能级

有一些非平面分子具有反演能级,其中氨分子(NH_3)特别引起我们注意. 氨的微波谱线很强,而且数目很多,它在分子波谱学的发展中起过重要作用:在天文上,它是第二个被射电望远镜观测到的星际分子(1968年),目前天文上已找到 NH_3 的许多谱线和许多 NH_3 源.

氨分子的结构是一个对称陀螺,3个H位于一个平面(xy 平面)上,N原子位于垂直于此平面的轴(z 轴)上(图 2.28),形成一个锥形.

在§2.6中讲过，对称陀螺型分子的能级可用 J,K 两个量子数标志，其能级图如图2.11所示. 每一个用 J,K 量子数标志的能级具有 $\pm K$ 态构成的二重简并，这种简并在陀螺的对称性被破坏时解除，成为 K 型双重能级. 但在 NH_3 分子中，这不是主要的，而且，在 NH_3 中，J,K 值不同的能级相距很远(转动常数大)，所以它们之间也没有像 CH_3CN(图2.12)那样的微波跃迁.

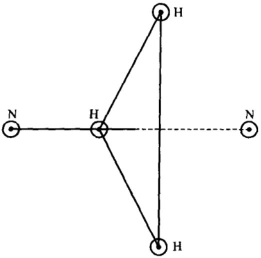


图2.28 NH_3 分子的结构. 虚线所示为N原子的反演位置

NH_3 的微波跃迁完全是由另一种原因造成的能级间隔产生的，它被称为反演能级. 反演能级本质上是由一种特殊条件下的(反演)振动运动所产生的，在 NH_3 分子中，就是N原子在3个H原子所构成的平面两边往复振动(即图2.28中N的两个位置间的振动). N原子在振动的过程中受到一个分子内部的势能场(参看图2.30)，这个势能场的中央部分对反演振动有阻碍作用. 为了理解反演能级，让我们回顾振动问题的处理. 在§2.5中讲过，若势能曲线是抛物线 $V(r)=\frac{1}{2}k(r-r_0)^2$，则量子化的振动能级的本征值为

$$E_{\text{vib}}=\hbar\omega_0\left(v+\frac{1}{2}\right) \tag{2.5.1}$$

其中 $\omega_0=\sqrt{\frac{k}{\mu}}$，$k$ 反映简谐振动作用力的强度，μ 为振子质量，$v=0,1,2,3,\cdots$ 为振动量子数. 结果，振动能级如图2.29(a)所示是等

距的(参看图 2.5). 能级间隔 $\Delta E_{vib}\propto\omega_0$. 和经典振子对应,$\frac{\omega_0}{2\pi}$正是振子的振动频率,$\tau=\frac{2\pi}{\omega_0}$则是振动一次所需要的时间.

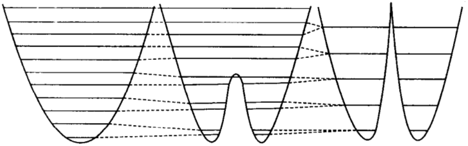


图 2.29 有势垒的势能曲线和能级的示意图

但如果势能抛物线中央出现了一个势垒情况就不同了,这时能级将一对一对地互相靠近,成为图 2.29(b)所示的情况. 当势垒非常高陡,如图中(c)的情形时,则能级仍是等距的,但此时 ΔE_{vib} 约为 $2\hbar\omega_0$,而且其中每一个能级是由两个能级合并而成的. 用经典的看法比喻的话,图(c)中势垒左右两边的两套能级可以认为是分别对应于振子以频率约为 $2\times\frac{\omega_0}{2\pi}$在势垒的这一边振动和在势垒的另一边振动.

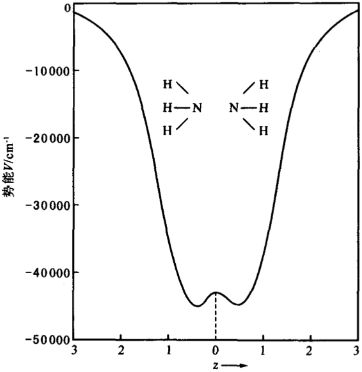
对于势垒不是无限高的情形(如图中(b),(c))中那些完全简并的能级将稍微分开. 按经典的看法,如果粒子的总能量(动能+势能)低于中央势垒的峰值的话,则粒子只能在峰的某一边振动. 因此有些文献中,仍沿用经典物理对图中(c)情形的说法. 形式地认为(b)图中那些成对靠近的能级中,每对中的一个对应于粒子在势垒这一边,另一个对应于势垒的另一边.

实际上,这是一种只能用量子力学解释的效应,即所谓的"隧道效应". 它允许总能量低于势垒峰值的粒子以一定的概率"穿透"(而不是越过)非无限高的势垒,在势垒的另一边出现. 所以当

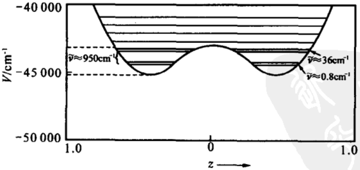
有限高的势垒出现于势能曲线当中时，振子还是可以在 $r>r_0$ 和 $r<r_0$ 的两个区域间往复振动. 按 Townes 的形象说法，它使那些穿透势垒而在势垒两边往复振动的粒子的振动周期变长了（振动频率变低了）. 势垒越高，穿透势垒的振动周期越长. 而在同样的势垒下，能量越低的粒子（即处于振动量子数 v 值小的振动状态的粒子）受势垒的阻碍更大，所以振动周期就更长（振动频率更低）.

量子力学的计算可以证明（参看参考资料[7]，p. 67，第 12 章），图 2.29(b)中每对靠得较近的两个振动能级之间的间隔 ΔE 正对应上述这种穿透势垒的振动频率. 所以能量低的振动态，每对能级间的间隔就小，而高一些的振动态间隔就大些，图(b)已定性的表示了这个情况. 至于图(b)中两个能级对之间的能量间隔则可以认为是反映粒子只在势垒一边振动时的振动频率的. 当势垒达到无限高时，粒子穿透概率为零，就只能在一边振动，这就是图 2.29(c)的情形. NH_3 分子中，按图 2.28 的结构，如以垂直于 3 个 H 原子平面的轴为 z 轴（平面处于 z 轴的零点），则 N 原子在 z 轴上运动时受到的势能大致如图 2.30 的情形. 这个势垒属中等高. 结果使最低一对振动态靠近到相当于微波跃迁的范围（波数 $\tilde{\nu}\approx 0.8\ cm^{-1}$，频率 $\nu\approx 2.4\times 10^4$ MHz. 其次一对振动态靠近到 $\tilde{\nu}\approx 36\ cm^{-1}$，它的跃迁对应于亚毫米波段的电磁波（频率 $\nu\approx 1\ 080$ GHz）.

所以，NH_3 在势垒峰值以下有 4 个振动能级，由于势垒的效果，互相靠近成两对（比势垒高的振动能级类似通常振动能级仍是近似等距离的，就是说，总能量高于势垒峰值的粒子可以在 H 原子平面两边自由振动，没有“穿透”问题. 但它们的能级仍受到势垒的影响，表明势垒对它们仍有一定阻碍作用）. 最低一对振动能级和其上面一对振动能级之间的距离 $\tilde{\nu}\approx 950\ cm^{-1}$，落在红外波段. 如前所述，微波波段的 $\nu\approx 2.4\times 10^4$ MHz 和亚毫米波段的 $\nu\approx 1\ 080$ GHz 可认为对应于穿透位垒的振动的频率，而红外波段的跃迁则对应只在位垒一边振动的频率.



(a)NH_3分子的势能曲线. z表示N原子距3个H原子组成的平面的距离



(b)示出图(a)中最低能量的部分以及最低的几个振动能级

图 2.30 (取自参考资料[7],p. 301,稍有修改)

Townes 说，把最低的一对能级间的跃迁叫做“反演”(翻转 inversion)跃迁的原因是“它的对应的经典运动是翻里向外”(“being turned inside out”)，即 N 原子从 3 个 H 原子构成的平面的一边翻到另一边.

现在我们清楚了，由于“穿透”效应，NH_3 分子的最低两个振动能级是靠得非常近的. 然而每个振动又各自有自己的转动能级组(即类似于图 2.11 的对称陀螺能级组). 可以想到，这两个转动能级组将叠在一起，原来(用 J,K 标志)的每个转动能级，现在将有另一个相应的能级在其旁边(它们属于另一个振动态)，形成一个一个能级对. 这些能级对之间的跃迁频率的值当然是在 2.4×10^4 MHz 附近的. 图 2.31 中示出一部分氨的反演能级对.

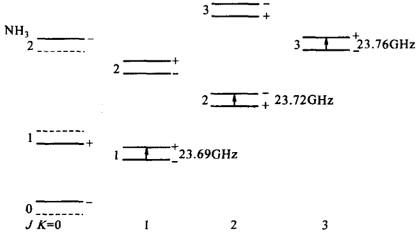


图 2.31　NH_3 分子的最低的几个反演能级对(取自参考资料[1]，p. 195)

如果这些能级对的间隔完全一样，则我们将只能看到一条谱线. 但事实上，由于其它许多原因，各能级对的间隔有所不同，这就使我们能够看到许多谱线，每条谱线就用 NH_3 的 J,K 值表示. 如图 2.31 中，最低的一个跃迁就写为(1,1)反演谱线. 氨分子各条反演谱线的精确数据已在参考资料[7]，p. 311 的表 12-13 中列出.

反演能级对的波函数总是一个对称(＋)，一个反对称(－)，它

们之间的跃迁总是允许的.

目前用射电天文方法在 23～25 GHz(1.2～1.3 cm)范围,在星际和拱星包层中已发现十几组氨分子的反转谱线,其 J,K 值为:

J,K=1,1;2,2;3,3;4,4;5,5;6,6;2,1;3,2;4,2;4,3;5,4;6,5;7,6;8,7;9,7;9,8;10,9.

顺便说明一下所谓"受碍运动(hindered motion)的概念". 在氨分子中,振动运动受到了势垒的阻碍,这是受碍运动中的一种类型. 除了这种类型外还有其它类型. 在天文分子中,CH_3OH(甲醇)分子就存在另一种受阻碍的运动. 甲醇的分子结构如图 2.32,可以看出,其中和 O 原子接在一起的 H 原子有 3 个能量上等效的位置(即绕分子轴每隔 120°一个位置),这个 H 原子在绕分子轴相对于分子的其余部分转动时,必须经过由 CH_3 的作用形成的三个势能峰值点,也就是说 H 原子的转动受到阻碍. 它是一种介于"完全自由的相对转动"(阻碍势能等于零)与"扭转振动"(势能的峰值很高,H 原子只能在两个峰值之间做往复的扭转振动)之间的过渡情形. 这使得 CH_3OH 的能级变得复杂(参看参考资料[7],§12.8～12.10).

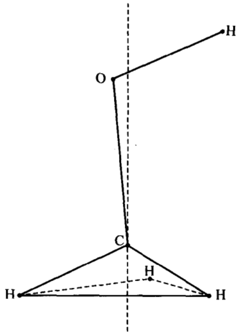


图 2.32 CH_3OH 分子的结构. 图中垂直的虚线为分子轴(取自参考资料[7],p.302)

下面讨论氨分子反演谱的超精细结构.

若再考虑到 N 核自旋 $\boldsymbol{I}_N$ 和分子场的电四极矩相互作用及氢核自旋 $\boldsymbol{I}_h$ 的磁相互作用，则氨分子每一个转动态的反演谱线还会再分裂成若干谱线，习惯上称为氨分子反演谱线的精细结构和超精细结构.（实质上，N 核自旋造成的能级分裂也应该属于超精细结构）．图 2.33 给出了氨的$(J,K)=(1,1)$的电四极矩精细结构、超精细能级以及谱分布轮廓.

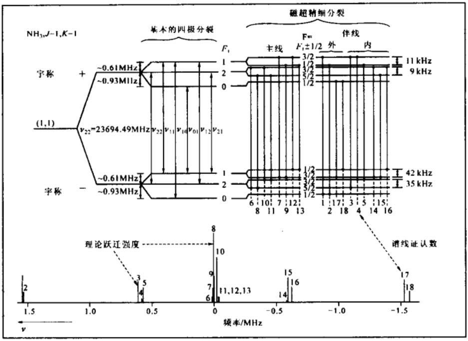
(1)电四极矩精细结构分裂

由于 N 核的电四极矩和分子中电子的相互作用，使每个反演态的能级都分裂成 3 个能级，这 3 个能级分别对应 $F_1=0,1,2$，$\boldsymbol{F}_1$ 是包含 N 核自旋 $\boldsymbol{I}_N$ 在内的分子总角动量 $\boldsymbol{F}_1=\boldsymbol{J}+\boldsymbol{I}_N$．对 F_1 的选择定则是 $\Delta F_1=0,\pm1$，如图 2.33(a)图左侧所示．其中，$\Delta F_1=0$，$F_1=0$ 的跃迁是禁戒的．符合上述选择定则的跃迁共有 6 种，但由于 $\Delta F_1=0$ 的两个跃迁有相同的频率($\nu_{22}=\nu_{11}$)，因此$(J,K)=(1,1)$反演谱线实际上分裂为 5 条精细结构谱线．中心的主线($\Delta F_1=0$)，大约占辐射总强度的 50%；两对伴线分别位于主线的两边，间隔约 1 MHz 左右．伴线和主线强度可比.

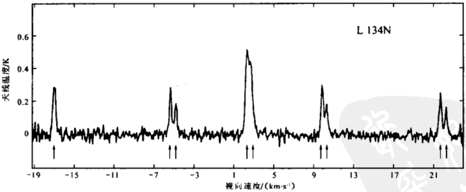
在星际分子云中，典型的动力学温度为 20 K，处于$(J,K)=(2,3)$，$(3,3)$，$(4,4)$…等高转动态的氨的布居数很少，因此在暗云里，我们只能观测到$(J,K)=(1,1)$的反演线和它的精细结构，对于那些温度较高的分子云热核，可能能观测到几种高转动态的反演线，不过即使主线可以观测，伴线也很弱，甚至根本就检测不到.

(2)氢核自旋的磁超精细结构

由于氨分子中 3 个 H 的核自旋的矢量和 $\boldsymbol{I}_h\neq0$($\boldsymbol{I}_h$ 为 3 个 H 核的总自旋，$|\boldsymbol{I}_h|=I_h(I_h+1)\hbar$，对 K 多重性不为 3 的情况，因不相容原理的限制，I_h 只能是$\frac{1}{2}$)．$\boldsymbol{I}_h$ 与 $\boldsymbol{F}_1$ 相互作用，使 NH_3 反演线的精细结构能级继续分裂(见图 2.33(a)的右侧)．对于 $K=1$ 的反演线，较高能级的超精细结构有大约 10 kHz 的间隔，而较低能级



(a)NH_3 分子 $J=1,K=1$ 反演谱线的超精细结构能级. 图中标出允许的跃迁. 图的下部给出理论计算的谱线的位置及强度



(b)用高灵敏、高分辨力接收设备在尘云 L 134N 中观测到的天文 NH_3 分子 $J=1$, $K=1$的反演谱线的超精细结构

图 2.33 (取自参考资料[6],p. 128)

结构有大约 40 kHz 的间隔. 上述相互作用结果得到总角动量 $F=F_1+I_h, F=F_1+I_h, F_1+I_h-1, \cdots, |F_1-I_h|$. 选择定则为 $\Delta J=0$, $\Delta K=0, \Delta F=0, \pm 1$, 其中 $\Delta F=0, F=0$ 的跃迁是禁戒的. 在这样的跃迁条件下,共有 18 个允许跃迁. 18 条超精细结构谱线的理论跃迁强度已描绘在图 2.33(a)的下方. (关于 NH_3 超精细结构的讨论可参看参考资料[7], § 3.4, § 8.10.)

图 2.33(b)给出天文观测的实际结果.

参 考 资 料

[1]Carson T R, Roberts M J. (eds.)Atoms and Molecules in Astrophysics. London and New York: Academic Press, 1972.

[2] 赫兹堡 G. 分子光谱和分子结构　第一卷:双原子分子光谱. 王鼎昌译. 北京:科学出版社,1983.

[3] 王国文. 原子与分子光谱导论. 北京:北京大学出版社,1985.

[4] 郑一善. 分子光谱导论. 上海:上海科学技术出版社,1963.

[5] 赫兹堡 G. 分子光谱和分子结构　第二卷:多原子分子的红外光谱与喇曼光谱. 王鼎昌译. 北京:科学出版社,1986.

[6] Rydbeck O E H, Hjalmarson A. In: Diercksen G H F, Huebner W F, Langhoff P W, ed. Molecular Astrophysics: State of the Art and Future Directions. Dordrecht: Reidel Publishing Company, 1985. 45～175.

[7] Townes C H, Schawlow A L. Microwave Spectroscopy. New York: McGraw Hill, 1955.

[8] 斯坦菲尔德 J I. 分子和辐射——近代分子光谱学. 李铁津译. 北京:科学出版社,1983.

第三章 天体物理环境下分子谱线的辐射转移

在厘米、毫米、亚毫米以及红外等波段,我们已经接收到了数以千计的来自上百种天体分子的谱线.它们产生于温度为 1 K 到 3 000 K 的广阔范围,如冷暗云、热云、拱星分子包层以及星际激波波前等物理条件相差悬殊的区域.这些来自分子云或星周包层的谱线为我们研究星际分子辐射区的物理状态、运动学结构和演化提供了大量信息.

由射电望远镜或红外望远镜得到的谱线资料有谱线强度、谱线轮廓以及观测到的线心频率相对谱线静止频率的偏移.如何由这些资料推求出分子云或拱星分子包层的运动温度、气体(主要是 H_2)密度、柱密度、某种分子的相对丰度以及分析它的运动和正在进行的物理过程,首先必须了解是什么样的过程决定了我们所得到的观测量.这就涉及到分子云或分子包层的谱线辐射转移理论,也即分子谱线形成的理论、它的微观过程和物理机制.

在具体的天体物理环境下,各种谱线轮廓形成的最直接反映是谱线辐射区的物理结构、速度场和谱线光厚等.从分子云的物质分布看,有均匀结构和不均匀结构(如团块、纤维状物质和空洞等)之分;从速度场性质看,又有热速度场和非热速度场(如系统运动和湍动运动)之分.谱线形成的进一步研究还涉及到分子云和拱星分子包层的动力学状态以及成协天体的演化.本章最后一节将具体分析在系统运动和湍动运动情况下分子谱线的成因.

有关分子谱线辐射转移中的一些问题,有兴趣的读者还可查阅 Winnewisser 等(1979 年),Genzel(1992 年),Elitzur(1992 年)

以及 Emerson(1996 年) 等人的专著[1~4].

§ 3.1　分子谱线的辐射转移

3.1.1　分子谱线的辐射转移方程

这里首先考虑处在一个平行 - 平面近似云中的谱线辐射转移方程. 此时通过云,沿视线方向的路径 ds,分子谱线比强度 I_ν(单位为 $\mathrm{W \cdot cm^{-2} \cdot Hz^{-1} \cdot sr^{-1}}$) 的改变满足下式：

$$\frac{\mathrm{d}I_\nu}{\mathrm{d}s} = j_\nu - \kappa_\nu I_\nu \tag{3.1.1}$$

先只考虑自发辐射,则发射系数

$$j_\nu = \frac{h\nu}{4\pi}\phi(\nu)\ n_\mathrm{u}\ A_\mathrm{ul}$$

其单位为 $\mathrm{W \cdot cm^{-3} \cdot Hz^{-1} \cdot sr^{-1}}$. 下标 u,l 表示产生频率为 ν 辐射跃迁的上、下能级, n_u 是上能级分子数密度(单位为 $\mathrm{cm^{-3}}$), A_ul是爱因斯坦自发辐射跃迁概率, $\phi(\nu)$ 为谱线的归一化轮廓函数,它表示在频率 ν 上单位频率间隔内发射一个频率为 ν 光子的概率,有关系式

$$\int_0^\infty \phi(\nu)\mathrm{d}\nu = 1$$

而

$$A_\mathrm{ul} = \frac{64\pi^4\nu^3\mu_\mathrm{ul}^2}{3hc^3} \tag{3.1.2}$$

μ_ul 为相应跃迁的电偶极矩阵元. $\mu_\mathrm{ul} = e\int \Phi_\mathrm{u}^* r \Phi_\mathrm{l} \mathrm{d}V$, Φ_u 和 Φ_l 分别表示跃迁初态和末态的分子波函数, $\mathrm{d}V$ 是积分体元. 对于双原子分子和线性分子的纯转动跃迁,当由 $J+1$ 能级跃迁到 J 能级时,可

得 $\mu_{ul}^2 = \mu_d^2 \dfrac{J+1}{2J+3}$，$\mu_d$是分子的永久电偶极矩；$J$ 是分子的转动量子数. 这样

$$A_{ul} = \frac{64\pi^4\nu^3\mu_d^2}{3hc^3}\frac{J+1}{2J+3} \tag{3.1.3}$$

主要天文分子在转动跃迁上以德拜为单位(1 Debye $= 3.34 \times 10^{-30}$C·m)的跃迁矩阵元见本书附录 Ⅱ. 宇宙中仅次于H_2分布最广、丰度最大的分子是CO. 它的 $\mu_d = 0.112$ Debye，由(3.1.3)式可求得CO从 $J=1$ 态跃迁到 $J=0$ 态的自发跃迁概率为 $7.4 \times 10^{-8}s^{-1}$. 这个值比H的Ly_α的A_{ul}要小得多. 因此在星际条件下CO是属于比较容易激发的分子. 同理可导出对称陀螺分子从 $J+1 \to J$ 的自发跃迁概率为

$$A_{ul} = \frac{64\pi^4\nu^3\mu_d^2}{3hc^3}\frac{(J+1)^2-K^2}{(J+1)(2J+3)} \tag{3.1.4}$$

式中 K 是转动角动量 $\boldsymbol{J}$ 在分子轴上的投影.

辐射转移方程(3.1.1)式中的第二项代表在频率 ν 的谱线中受激吸收和受激发射的净效应. 因此 κ_ν 也称净吸收系数，有

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu}{4\pi}(n_l B_{lu} - n_u B_{ul})\phi(\nu) \tag{3.1.5}$$

单位为cm^{-1}. 其中B_{lu},B_{ul}为爱因斯坦受激辐射跃迁概率，n_l是下能级分子数密度(单位 cm^{-3})，在频率 ν 上的谱线光深为

$$\tau_\nu = \int_0^L \kappa_\nu ds$$

其中 L 为分子云沿视线方向上的长度. 于是(3.1.1)式变为

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = S_\nu - I_\nu \tag{3.1.6}$$

源函数

$$S_\nu = \frac{j_\nu}{\kappa_\nu} = \frac{n_u A_{ul}}{n_l B_{lu} - n_u B_{ul}}$$

由于
$$g_l B_{lu} = g_u B_{ul};\ A_{ul} = B_{ul}\frac{2h\nu^3}{c^2} \tag{3.1.7}$$
所以
$$S_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1}{\frac{n_l g_u}{n_u g_l} - 1} \tag{3.1.8}$$
g_u 和 g_l分别代表上、下能级的统计权重. 由于谱线的激发温度 T_{ex} 由下式(即热的玻耳兹曼布居分布关系)定义,即
$$\frac{n_u g_l}{n_l g_u} = \exp\left(-\frac{h\nu}{kT_{ex}}\right) \tag{3.1.9}$$
所以
$$S_\nu = B_\nu(T_{ex})$$
即源函数是在谱线激发温度上的普朗克函数,而激发温度则是一个等效的普朗克温度.

上面所讨论的仅是一种简单情况下谱线的辐射转移. 如果在分子源的同一体积中同时还存在连续谱发射,则辐射转移方程变成更一般的形式,即
$$\frac{dI_\nu}{ds} = \kappa_l S_l + \kappa_c S_c - \kappa_{tot} I_\nu \tag{3.1.10}$$
S_l,S_c 分别表示谱线和连续谱发射的源函数,κ_l,κ_c 则分别对应频率 ν 上谱线和连续谱的吸收系数,而 $\kappa_{tot} = \kappa_l + \kappa_c$ 为总吸收系数.

3.1.2　天文分子谱线剩余强度和亮温的计算

为了计算谱线的强度 I_ν,最简单的步骤是沿视线方向积分方程(3.1.1)式. 对于一个光学厚度为 τ 的分子云,其出射强度为
$$I_\nu = \int_0^{\tau_\nu} S_\nu e^{-(\tau_\nu - t_\nu)} dt_\nu + I_{bg} e^{-\tau_\nu} \tag{3.1.11}$$
如果 S_ν 或 T_{ex}为常数,则
$$I_\nu = B_\nu(T_{ex})(1 - e^{-\tau_\nu}) + I_{bg} e^{-\tau_\nu} \tag{3.1.12}$$
I_{bg} 为分子云的背景辐射强度. 只要 T_{ex}, I_{bg} 以及 τ_ν 知道,原则上即可求得分子谱线的出射强度 I_ν. 由(3.1.5)、(3.1.9)二式知,T_{ex} 和

τ_ν 均与分子能级布居数 n_l 和 n_u 有关. 由(3.1.9) 可得

$$T_{ex} = \frac{h\nu}{k} \Big/ \ln\left(\frac{n_l g_u}{n_u g_l}\right) \tag{3.1.13}$$

如果背景源的发射在谱线频率附近与频率无关(连续发射),且强度为 I_{bg},而分子云的发射为纯谱线辐射,那么 $I_\nu - I_{bg}$即为谱线的剩余强度,记作 ΔI,由(3.1.12) 式可得

$$\Delta I = (B_\nu(T_{ex}) - I_{bg})(1 - e^{-\tau_\nu}) \tag{3.1.14}$$

在谱线辐射和连续辐射同时存在时,分子谱线的辐射强度由求解方程(3.1.10) 式得到. 在 $S_c \approx S_l$,且不存在背景连续源时,很容易积分方程(3.1.10) 式,求出谱线的剩余强度如下:

$$\Delta I = S_l(1 - \exp(-\tau_l)) \cdot \exp(-\tau_c)$$

与(3.1.14) 式相比,多了一个 $\exp(-\tau_c)$ 因子. 这种情况对于处在光学厚 H Ⅱ 区中的射电复合线有重要应用. 也适于测量存在尘埃时的 H_2,HD 等分子的远红外的转动发射和吸收. 例如:H_2 分子的基态转动跃迁(S(0),$\lambda = 28\ \mu m$),其爱因斯坦 A 系数很小,仅 $2.9 \times 10^{-11} s^{-1}$. 取正常尘埃 - 气体质量丰度比($10^{-2}$),并假设 $T_{gas} \approx T_{dust}$,可以得到 S(0) 谱线与尘埃在波长 28 μm 上的吸收系数之比 $\approx 1/200$. 因此在计算谱线出射强度时必须考虑尘埃的红外连续谱吸收.

在实际的天文测量中,人们所观测的分子云常常没有完全填满望远镜的波束,这样就有必要用一个波束填充因子 f 来修正方程(3.1.14) 式. 所谓波束填充因子指的是观测者对源所张立体角与天线波束立体角的比率. 这里我们用 f_L和 f_{bg}分别表示谱线和背景连续源的波束改正因子. 这样方程(3.1.14) 式就变成

$$\langle \Delta I \rangle_{beam} = (f_L B_\nu(T_{ex}) - f_{bg} I_{bg})\langle 1 - \exp(-\tau_\nu)\rangle \tag{3.1.15}$$

方程中〈〉表示括号中的量对波束求平均. 当

$f_L B_\nu(T_{ex}) > f_{bg} I_{bg}$ 谱线处在发射线里

$f_L B_\nu(T_{ex}) < f_{bg} I_{bg}$　　谱线处在吸收线里

如果天线波束是高斯分布的，其半极大全宽(FWHM) $= \theta_B$，而谱线(或连续背景)源是二维高斯分布的，在 x 和 y 方向上的半极大宽度分别为 θ_{sx} 和 θ_{sy}，则方程(3.1.15)式中的填充因子可以写成

$$f = \frac{\theta_{sx}}{\sqrt{\theta_{sx}^2 + \theta_B^2}} \cdot \frac{\theta_{sy}}{\sqrt{\theta_{sy}^2 + \theta_B^2}}$$

如果源是盘状的，盘的直径是 θ_D，则填充因子

$$f = 1 - \exp[-(\ln 2)(\theta_D/\theta_B)^2]$$

在射电天文中，还习惯用亮温度来表示辐射强度. 当 $h\nu \ll kT$ 时，可以采用普朗克公式的瑞利 - 金斯近似公式，即普朗克函数或亮度为

$$B_\nu = \frac{2kT}{\lambda^2} = \frac{2kT}{c^2}\nu^2$$

则亮温度

$$T = \frac{c^2}{2k\nu^2}B_\nu \quad 或\ T = \frac{c^2}{2k\nu^2}I_\nu$$

然而，在毫米波段上，瑞利 - 金斯近似不再成立. 但如果我们令温度

$$\tilde{T} = \frac{h\nu}{k}\left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1\right]^{-1} \tag{3.1.16}$$

则仍然可以很方便地用温度来表示谱线和背景辐射的强度以及源函数，即

$$I_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT_R}\right) - 1\right]^{-1} = \frac{2k\nu^2}{c^2}\tilde{T}_R$$

$$S_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left[\mathrm{epx}\left(\frac{h\nu}{kT_{ex}}\right) - 1\right]^{-1} = \frac{2k\nu^2}{c^2}\tilde{T}_{ex}$$

$$I_{bg} = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT_{bg}}\right) - 1\right]^{-1} = \frac{2k\nu^2}{c^2}\tilde{T}_{bg} \tag{3.1.17}$$

当 $h\nu/k \ll T_R, T_{ex}$和 T_{bg} 时，显然 $\tilde{T} \approx T$. 当 $h\nu/k < T_R, T_{ex}$和 T_{bg} 时，$\tilde{T} \approx T - (1/2)(h\nu/k)$. 这里的 T_R, T_{bg} 称作普朗克 - 亮温度，而 $\tilde{T}_R$ 和 $\tilde{T}_{ex}$ 则分别称作瑞利 - 金斯辐射温度和激发温度，后者也称等效激发温度. 类似地，也可相应地用温度来表示谱线的剩余强度 $\langle \Delta I_L \rangle$，即令

$$\langle \Delta I_L \rangle = \frac{2k\nu^2}{c^2} T_L$$

T_L 称作谱线的剩余亮温. 这样方程(3.1.15)式也可写成如下形式：

$$T_L = (f_L \tilde{T}_{ex} - f_{bg} \tilde{T}_{bg})(1 - \exp(-\tau_\nu)) \quad (3.1.18)$$

将关系(3.1.17)式代入，方程(3.1.18)式变成

$$T_L = \frac{h\nu}{k} \langle 1 - e^{-\tau_\nu} \rangle \left[f_L (e^{h\nu/kT_{ex}} - 1)^{-1} - f_{bg} (e^{h\nu/kT_{bg}} - 1)^{-1} \right] \quad (3.1.19)$$

当只考虑宇宙微波背景辐射时，则背景亮温度 $T_{bg} = T_{BB} = 2.7$ K.

方程中的谱线光厚 τ_ν 可以由吸收系数 κ_ν 以及 A_{ul}, B_{ul}和 B_{lu}间的关系求得，即

$$\kappa_\nu = \frac{c^2 A_{ul}}{8\pi\nu^2} \left(\frac{g_u}{g_l} \right) n_l \left(1 - \frac{n_u g_l}{n_l g_u} \right) \phi(\nu) = \frac{c^2 g_u A_{ul} n_l}{8\pi g_l \nu^2} \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT_{ex}}} \right) \phi(\nu) \quad (3.1.20)$$

$$\tau_\nu = \frac{c^2 g_u A_{ul}}{8\pi g_l \nu^2} N_l \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT_{ex}}} \right) \phi(\nu)$$

式中 $N_l = \int_0^L n_l \mathrm{d}s$ 是下能级上分子的柱密度.

在有连续背景射电源存在时，若它的亮温度为 T_s，则总的背景亮温度 $T_{bg} = T_{BB} + T_s$，(3.1.18)式即可写成

$$T_L = (f_L \tilde{T}_{ex} - (1 - f_s) \tilde{T}_{BB} - f_s \tilde{T}_s) \langle 1 - e^{-\tau_\nu} \rangle \quad (3.1.21)$$

式中 f_s 是背景射电源的波束填充因子.

3.1.3 谱线的光学厚度

(3.1.20) 式表明,谱线光厚正比于下能级上分子的柱密度. 谱线光厚也可用上能级的分子柱密度表示,即

$$\tau_\nu = \frac{c^2 A_{ul}}{8\pi\nu^2} N_u (e^{\frac{h\nu}{kT_{ex}}} - 1)\phi(\nu) = \frac{c^2}{8\pi}\frac{A_{ul}}{\nu^3}\frac{\nu}{\Delta\nu_0} N_u (e^{\frac{h\nu}{kT_{ex}}} - 1) \tag{3.1.22}$$

式中 $N_u = \int_0^L n_u ds$ 即上能级的分子柱密度. 由 τ_ν 的表达式可见,谱线光厚与分子上、下能级的布居数有关,与该分子种类的丰度有关,也与比值 A_{ul}/ν^3 有关. 由于 $(\mu_{ul})^2 \propto A_{ul}/\nu^3$,谱线光厚又正比于分子跃迁的偶极元平方. 通常有极分子在电子跃迁或转动跃迁中有最大的电偶极矩,因此它们相应的谱线光厚要大于分子的振动和原子的精细结构的谱线光厚. 如许多具有永久电偶极矩的分子在毫米和亚毫米波段上的谱线,其跃迁矩阵元 $\mu_{ul} \approx 1 \sim 3$ Debye. 然而无极分子如CO和HD等则例外. CO在转动跃迁中的 $\mu_{rot} \approx 0.112$ Debye, HD的 $\mu_{rot} \approx 5.8 \times 10^{-4}$ Debye. 至于星际物质中最丰富的分子 H_2,由于是同核分子,不具有永久性的电偶极矩,只有电四极跃迁. 在中 - 红外波段的分子转 - 振谱线,其偶极跃迁元也大约只有0.1 Debye. 原子精细结构谱线的跃迁元则更小,大约为 $(3 \sim 8) \times 10^{-3}$ Debye,与电偶极跃迁相比,磁偶极与电四极跃迁的矩阵元要小得多,因此相应的辐射跃迁概率和光厚也要低得多. 对于这种谱线很容易通过碰撞来激发.

现在再回到方程(3.1.22)式. 已知热平衡下,温度为 T 时,某个能级上的分子柱密度可由温度 T 上的配分函数 $Q(T)$ 求得,即

$$N_u = g_u \exp(-E_u/kT) \cdot N/Q(T) \tag{3.1.23}$$

式中 $Q(T)=\sum_i g_i \exp(-E_i/kT)$，$E_i$ 是能级 i 上的能量；N 是每 cm^2 上分子的总数，即分子柱密度. 对处在热平衡中，转动常数为 B 的双原子分子或线形多原子分子的转动能级，其

$$
\begin{aligned}
Q(T) &= \sum_j (2J+1)\exp\left(-\frac{hBJ(J+1)}{kT_{ex}}\right) \\
&\approx \int_0^\infty (2J+1)\exp\left(-\frac{hBJ(J+1)}{kT_{ex}}\right)\mathrm{d}J \\
&= \int_0^\infty \exp\left(-\frac{hBJ'}{kT_{ex}}\right)\mathrm{d}J' = \frac{kT_{ex}}{hB}
\end{aligned}
$$

式中 B 为分子的转动常数，$J'=J^2+J$. T_{ex} 为激发温度，这里的 T_{ex} 也称转动温度，常记作 T_{rot}. 对于多原子的对称陀螺分子的转动能级（此时分子相对 3 个对称轴的转动常数满足：$B_1=B_2\neq B_3$），用同样方法可推得

$$Q(T_{rot})\approx 1.8(kT_{rot}/hB_1)^{3/2}(B_1/B_3)^{1/2}$$

对于在振动温度 T_{vib} 上的振动能级，有

$$Q(T_{vib})=(1-\exp(-h\nu_{vib}/kT_{vib}))^{-1}$$

通常 $Q(T_{vib})\approx 1$.

在天文应用中，高 J 态和高 v 态通常是亚 - 热布居的. 此时与热平衡相比，实际的配分函数随温度增加得很慢. 因此近似地可认为 $Q(T)$ 为常数.

方程(3.1.20)和(3.1.22)式中的 $\Delta\nu_0$ 在天文中常用速度的多普勒关系，即 $\Delta\nu_0=\nu\Delta v/c$ 导出. 对于红外跃迁，$h\nu>kT_{ex}$ 且 $N_u\ll N_1\approx N$，这样在红外上的谱线光厚

$$\tau_{IR}\propto(\mu_{ul})^2 N/(\Delta v Q(T)) \tag{3.1.24}$$

对于射电跃迁，$h\nu\ll kT_{ex}$，谱线光厚

$$\tau_{rad}\propto(\mu_{ul})^2\frac{h\nu_{rad}}{kT_{ex}}\frac{N}{\Delta v Q(T)} \tag{3.1.25}$$

这样，一个已知分子红外和射电谱线光厚的比率可写成

$$\frac{\tau_{\mathrm{IR}}}{\tau_{\mathrm{rad}}} \approx (\mu_{\mathrm{IR}}/\mu_{\mathrm{rad}})^2 kT_{\mathrm{ex}}/h\nu_{\mathrm{rad}} \tag{3.1.26}$$

对于典型的热分子云，其$kT_{\mathrm{ex}}/h\nu_{\mathrm{rad}} \approx 10 \sim 100$. 这样在红外／亚毫米波上的转动跃迁的光厚要比毫米或厘米波上转动跃迁的光厚大$1 \sim 2$个量级. 对于丰富分子，诸如CO，HCN，NH_3和H_2O在致密分子云中的远红外和亚毫米谱线可能是非常光厚的($\tau \approx 10^2 \sim 10^3$). 在中-红外的转-振跃迁中，$(\mu_{\mathrm{IR}}/\mu_{\mathrm{rad}})^2 \approx 10^{-2}$，因此它们有与射电跃迁相似的光学厚度.

3.1.4　分子谱线辐射转移中的几种极限情况　分子的吸收谱和发射谱

下面介绍在$h\nu \ll kT$条件(也即在(3.1.16)式中$\tilde{T} = T$的情况)下，分子谱线辐射转移中的几种极限情况. 在做具体讨论前先作两点说明：

(1) 假设天线对谱线源和背景源的波束填充因子相同，并记作f.

(2) 考虑到跃迁矩阵元$\mu_{\mathrm{ul}}{}^2 \propto A_{\mathrm{ul}}/\nu^3$，谱线轮廓函数$\phi(\nu) \sim 1/\Delta\nu_{\mathrm{L}}$，(3.1.20)式可写成

$$\tau_\nu = \frac{c^2}{8\pi}\frac{g_u}{g_l}\mu_{\mathrm{ul}}^2\frac{\nu}{\Delta\nu_l}\left(1 - \mathrm{e}^{-\frac{h\nu}{kT_{\mathrm{ex}}}}\right)N_l \approx \frac{c^2}{8\pi}\frac{g_u}{g_l}\mu_{\mathrm{ul}}^2\frac{\nu^2}{\Delta\nu_l}N_l\left(\frac{h}{kT_{\mathrm{ex}}}\right) \tag{3.1.27}$$

参看(3.1.18)式，下面就光学厚($\tau \gg 1$)和光学薄($\tau \ll 1$)两种情况分别进行讨论.

	$\tau \gg 1$	$\tau \ll 1$
(1) 自发发射		
$\tau > 0, T_{\mathrm{ex}} > T_{\mathrm{bg}}$ ($n_{\mathrm{u}} < n_l$)	$T_{\mathrm{L}} \sim fT_{\mathrm{ex}}$	$T_{\mathrm{L}} \sim f\,T_{\mathrm{ex}}\tau_\nu \propto \frac{f\lvert\mu\rvert^2\nu^2}{\Delta\nu_{\mathrm{L}}}N_l$

(2)吸收

$\tau>0$, $T_{ex}<T_{bg}$ $\quad T_L \sim f(T_{ex}-T_{bg})$ $\quad T_L \sim f(T_{ex}-T_{bg})\tau_\nu$

$(n_u<n_l)$ $\quad \propto -f\dfrac{T_{bg}}{T_{ex}}\dfrac{|\mu|^2\nu^2}{\Delta\nu_L}N_l$

(3)负吸收(净放大)

$\tau<0$, $T_{ex}<0$ $\quad T_L \sim f\,T_{bg}e^{|\tau_\nu|}$ $\quad T_L \sim f\dfrac{T_{bg}}{|T_{ex}|}\dfrac{|\mu|^2\nu^2}{\Delta\nu_L}N_l$

$(n_u>n_l)$

讨论:

(1)若背景辐射源$T_{bg}=T_s+T_{BB}$,且T_s为射电源.由于通常射电源的辐射具有负幂律的形式,即$T_s\sim\nu^{-n}(n>0)$,这样,频率越低,背景亮温度T_s越高.致使$T_{ex}<T_{bg}$,这就解释了在厘米波段上分子谱线常常在吸收线中看到,而在毫米波段,由于$T_s\to0$,故分子谱线都在发射线里看到.

(2)在光学厚度$\tau\gg1$,$T_{ex}>T_{bg}$情况下,$T_L\sim fT_{ex}$,这样,用谱线亮温度可定出T_{ex}.这适于^{12}CO的情况.在光学厚度$\tau\ll1$,$T_{ex}>T_{bg}$,且仍满足$h\nu\ll kT_{ex}$的条件下,谱线亮温

$$T_L \approx fT_{ex}\tau_\nu = f\frac{g_u}{g_l}\frac{c^2A_{ul}h}{8\pi k\nu}N_l\phi(\nu) \tag{3.1.28}$$

用(3.1.2)式代入,得

$$\int T_L d\nu = f\frac{8\pi^3\nu^2}{3kc}\frac{g_u}{g_l}\mu_{ul}^2N_l \tag{3.1.29}$$

这时谱线强度T_L或者谱线积分强度$\int T_L d\nu$将正比于分子跃迁低能态里的分子柱密度N_l.总的分子柱密度需要对所有态取和(详见下节).这种方法适用于研究光薄的^{13}CO分子谱线.

下面再就分子的吸收谱和发射谱作进一步讨论.在$T_{ex}<T_{bg}$时,得到分子谱的吸收线.分子的吸收谱有以下几种典型情况:

(1)$T_{bg}=2.7$ K(微波背景辐射),$T_{ex}<T_{bg}$情况

如甲醛(H_2CO) 在 $\lambda = 2$ cm，6 cm 上的辐射. 由于这种分子的激发温度比宇宙背景辐射的等效黑体温度还低，因此在没有任何局部连续源存在时也会产生吸收. 它说明在甲醛情况下分子能级是过冷分布的. 我们称其为反常冷却或负脉泽. 它与脉泽一样，也是一种非平衡现象. 观测表明，在一个很宽的密度和温度范围内甲醛分子都是过冷的.

(2)T_{bg} 为射电连续谱，$T_{ex} < T_{bg}$ 情况

当大质量年轻星所激发的 HII 区作为分子源的背景时就属于这种情况. 如上分析，此时产生的吸收线主要在厘米波段. 如氨(NH_3) 在 $\lambda = 1.3$ cm 上在 DR21 和 SgrB2 等分子云中的辐时(见图 3.1).

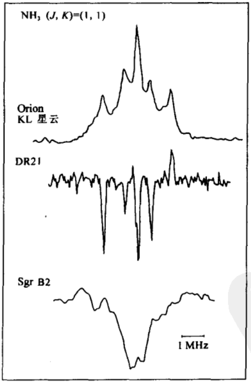


图 3.1　NH_3在 $\lambda = 1.3$ cm 上，在 DR21 和 SgrB2 分子云中的吸收谱[5]. 作为比较，上图给出的是 NH_3 在 Orion KL 星云中的发射谱

(3)T_{bg}为红外连续谱，$T_{ex} < T_{bg}$ 情况

如正在形成恒星的区域，原恒星本身以及热尘埃等均属于这种情况，此时可观测到分子的红外吸收线. 如对着猎户座星云 BN 天体时观测到 CO 的 $v = 2 \leftarrow 0$；$1 \leftarrow 0$ 的红外吸收谱线. 这些以明亮的近红外和中红外连续谱源为背景的分子转 - 振吸收谱是研究拱星气体的重要工具.

在所有的 $T_{ex} > T_{bg}$ 情况下，则产生分子辐射的发射线. 除了那些表现出极高亮温的脉泽谱外，大多数的分子发射为热平衡下的正常发射谱线. 其中最常见的又是分子的转动激发谱线. 这里我们着重介绍一下线形分子在 $\tau \ll 1$ 和 $\tau \gg 1$ 等两种极限情况下转动发射谱的一些基本性质.

由第二章知，双原子和线形多原子分子如 CO,CS,CN,HCN 等有简单的能级公式，即

$$E_J = hBJ(J+1)$$

B 是分子的转动常数. 从 $J \to J-1$ 的跃迁发生在频率 $\nu_J = 2BJ$ 上. 根据(3.1.22)式，在瑞利 - 金斯近似范围(即 $h\nu_J/kT_{ex} < 1$)内，频率 ν_J 上的光学厚度

$$\tau_{\nu_J} \propto \left(e^{\frac{h\nu_J}{kT_{ex}}} - 1\right) N_J \propto \nu_J g_J \propto J^2 \qquad (3.1.30)$$

谱线的积分强度 I_J 和亮温度在光学薄时分别为

$$\left.\begin{aligned} I_J &= \frac{2k\nu^2}{c^2} T_{ex} \tau(\nu_J) \Delta\nu \propto J^5 \\ T_J &= T_{ex} \tau(\nu_J) \propto J^2 \end{aligned}\right\} \quad (\tau(\nu_J) \ll 1) \qquad (3.1.31)$$

在光学厚时分别为

$$\left.\begin{aligned} I_J &= \frac{2k\nu^2}{c^2} T_{ex} \Delta\nu \propto J^3 \\ T_J &= T_{ex} \end{aligned}\right\} \quad (\tau(\nu_J) \gg 1) \qquad (3.1.32)$$

考虑到谱线的激发，在温度 T_{rot} 上最强的转动发射大约发生在 $E_J = hBJ(J+1) \approx kT_{rot}$ 情况下，即

$$J_{\max} \approx \sqrt{\frac{T_{\mathrm{rot}}}{hB/k}} \tag{3.1.33}$$

以天文中高丰度的CO分子为例，其$hB/k = 2.76$ K. 当$T = 10$ K时，其最强的谱线发射在1.3 mm的$J = 2 - 1$跃迁上. 对于一个较暖的云，$T = 50 \sim 100$ K，最强的发射是在$J \approx 4 \sim 7$范围内的亚毫米谱线. 当温度升高到1 000 K时，在远红外波长上($\lambda \approx 50 \sim 200\ \mu$m，$J = 20 \sim 40$) 有最强发射. 因此利用(3.1.33) 式关系可以很好地示踪分子云的温度. 分子的转动发射同时也与密度有关. 在温度一定时，密度越高，最强的CO发射对应的J越大.

3.1.5 局部热动平衡(LTE) 下分子柱密度的计算

当所研究的区域不再保持温度处处一样时，人们常常用LTE的方法来处理它们. 在分子云情况下，所谓LTE方法就是假设分子云处于局部热动平衡，忽略辐射对分子按能级布居的影响，而简单地用在LTE下的玻耳兹曼分布代替星际云条件下分子的真实分布，并定出所需物理参量来. LTE方法虽然是一种近似性较大的方法，但它是提供模型方法所需要的一定输入量的计算方法之一. 特别是在不易建立具体模型时，LTE方法是一个基本的并被广泛运用的方法. 30多年来分子谱线的观测证明，分子谱线是诊断分子云基本物理参量的最好探针. 迄今已经发展了一系列所谓标准的技术来确定分子云的各种物理参量. 例如：在局部热动平衡下，用^{12}CO的$J = 1 - 0$或NH_3的不同亚稳能级间的转动谱线来估算分子云的运动温度；用光学薄的^{13}CO或^{18}CO的$J = 1 - 0$谱线计算分子云的柱密度. 在非热动平衡(Non-LTE) 下，采用适于大速度场梯度(LVG) 或者微观湍动运动的辐射转移技术来确定分子云的密度、温度、某种分子的相对丰度以及速度场梯度或湍动速度等. 本节主要介绍利用CO及其同位素^{13}CO或^{18}CO等分子确定分子柱密度的LTE方法. 对涉及的分子云温度、激发温度以

及谱线光厚等的计算也有讨论. 而LVG以及微观湍动等模型方法将放在本书的3.3.3节和3.4.3节中予以介绍.

首先作一般性的讨论. 假设有一个均匀的光学薄的分子云，处于局部热动平衡中. 分子谱线的辐射满足长波近似条件，即 $h\nu/kT \ll 1$，且 $T_{ex} > T_{bg}$. 则由(3.1.28)式可得谱线亮温对谱线轮廓的积分为

$$\int T_L d\nu \approx f \frac{g_u}{g_l} \frac{c^2 A_{ul} h}{8\pi k \nu} N_l \tag{3.1.34}$$

N_l 是跃迁下能级的分子柱密度，f 是对源的天线波束填充因子. 根据(3.1.23)式有

$$N_l = g_l \exp(-E_l/kT_{ex}) N/Q(T) \tag{3.1.35}$$

式中 $Q(T)$ 是配分函数，N 是所研究分子的总柱密度. 3.1.3节中已经导出，在热平衡下，转动常数为 B 的双原子分子或线形多原子分子的转动能级，其配分函数近似为 kT_{ex}/hB. 假设转动跃迁发生在转动量子数 $J+1 \rightarrow J$ 之间，则统计权重 $g_u = 2J+3$，$g_l = 2J+1$，转动能级 $E_l = hBJ(J+1)$，跃迁频率 $\nu = 2B(J+1)$. 将所有这些量代入(3.1.35)和(3.1.34)式，最后得

$$\begin{aligned}\int T_L d\nu &\approx f \frac{2J+3}{2J+1} \frac{c^2 A_{ul} h}{8\pi k 2B(J+1)} \frac{hB}{kT_{ex}} (2J+1) \cdot \\ &\exp\left[-\frac{hBJ(J+1)}{kT_{ex}}\right] N = \frac{c^2 h^2}{16\pi k^2} \frac{1}{T_{ex}} A_{ul} \frac{2J+3}{J+1} \cdot \\ &\exp\left[-\frac{hBJ(J+1)}{kT_{ex}}\right] N\end{aligned} \tag{3.1.36}$$

可见，只要知道所研究分子的谱线亮温的积分强度，自发跃迁概率 A_{ul}，那么原则上就可由上式求出所有谱线光薄分子的柱密度来. 最后，再由该分子相对 H_2 的星际丰度求出分子云中主要分子 H_2 的柱密度.

然而，在实际问题中，由于CO分子的高稳定、高丰度、广泛分布和易测量的特性，人们更多的是利用 ^{12}CO 及其同位素 ^{13}CO 分子

的 $J=1-0$ 跃迁来确定分子云的温度和柱密度. 在3.1.2节中已得到在考虑天线波束效应时，分子谱线的剩余亮温由(3.1.19)式表示. 当天线的波束填充因子 $f_L = f_{bg} = f$ 时，(3.1.19)式变为

$$T_L = \frac{h\nu}{k}\left[\left(e^{h\nu/kT_{ex}}-1\right)^{-1}-\left(e^{h\nu/kT_{bg}}-1\right)^{-1}\right]\left(1-e^{-\tau_\nu}\right)f \tag{3.1.37}$$

如果 T_R^* 是对所有天线损耗以及CO发射的波束填充因子改正后的峰值天线温度，也称谱线的辐射温度，则有

$$T_R^* = \frac{h\nu}{k}\left[\left(e^{h\nu/kT_{ex}}-1\right)^{-1}-\left(e^{h\nu/kT_{bg}}-1\right)^{-1}\right]\left(1-e^{-\tau_\nu}\right) \tag{3.1.38}$$

通常取 $T_{bg}=2.7$ K(宇宙背景辐射)，代入CO，$J=1-0$ 和 ^{13}CO，$J=1-0$ 的频率可得下式：

$$T_R^*(^{12}CO, 1-0) = 5.532\left[\frac{1}{e^{5.532/T_{ex}}-1}-0.1479\right]\left(1-e^{-\tau_\nu}\right) \tag{3.1.39}$$

$$T_R^*(^{13}CO, 1-0) = 5.289\left[\frac{1}{e^{5.289/T_{ex}}-1}-0.1642\right]\left(1-e^{-\tau_\nu}\right) \tag{3.1.40}$$

有关 T_R^* 的实际测量见页下注*. 根据 ^{13}CO 同位素分子的测量，可以证明 ^{12}CO 分子在通常情况是光厚的. 已知，太阳系中 ^{12}C 和 ^{13}C 的丰度比值 $^{12}C/^{13}C \approx 90$，而在分子云中 ^{12}CO 和 ^{13}CO 实际的强度比要比90小得多. 这就说明在分子云中，^{12}CO 的 $J=1-0$ 发射是饱

* 假设 T_A 是望远镜经大气衰减改正后的天线温度(这里指谱线辐射)，T_A^* 是经天线后向损耗和天线罩效率改正后的天线温度，则 $T_A^* = T_A/\eta_l\eta_r$. η_l 是天线后向散射系数(因天线的辐射损耗，满溢和散射引起)，η_r 是天线罩效率. T_R^* 是经天线前向散射和波束填充因子改正后的天线温度，也即谱线辐射温度，则 $T_R^* = T_A^*/\eta_{fss}f$，$\eta_{fss}$ 是天线前向满溢和散射效率，f 为波束填充因子. 当源是均匀的，且充满天线波束时，$f=1$.

和的，或者说，^{12}CO 的 $J = 1 - 0$ 跃迁是光学厚的. 从而可推得激发温度为

$$T_{ex} = \frac{h\nu}{k}\left\{\ln\left[1 + \left(\frac{kT_R^*(^{12}\mathrm{CO})}{h\nu} + \frac{1}{e^{h\nu/kT_{bg}} - 1}\right)^{-1}\right]\right\}^{-1} \tag{3.1.41}$$

代入^{12}CO，$J = 1 - 0$ 的频率，可得

$$T_{ex} = 5.532\left\{\ln\left[1 + \frac{5.532}{(T_R^*(^{12}\mathrm{CO}) + 0.819)}\right]\right\}^{-1} \tag{3.1.42}$$

通过上式很容易由观测到的^{12}CO$(1-0)$ 的谱线辐射温度导出CO 的激发温度 T_{ex} 来. T_{ex} 是计算分子总柱密度时所必备的参数.

鉴于在大多数情况下，^{12}CO 分子是碰撞支配粒子数布居的，即 $A_{10} \ll C_{10}$，所以 $T_{ex} \sim T_k$，这样就得到了分子云的运动温度.

确定分子总柱密度的一个最常用的方法是首先确定 CO 同位素分子^{13}CO 的柱密度 $N(^{13}\mathrm{CO})$. 通常^{13}CO 的 $J = 1 - 0$ 跃迁是光学薄的，即 $\tau(^{13}\mathrm{CO}) < 1$. 另外假设在同一个云内，$T_{ex}(^{12}\mathrm{CO}) = T_{ex}(^{13}\mathrm{CO})$，那么由(3.1.38) 式可得

$$\frac{T_R^*(^{12}\mathrm{CO})}{T_R^*(^{13}\mathrm{CO})} \approx \frac{(1 - e^{-\tau(^{12}\mathrm{CO})})}{(1 - e^{-\tau(^{13}\mathrm{CO})})} \tag{3.1.43}$$

由于 $\tau(12)/\tau(13)$ 等于两种分子的丰度比$[^{12}\mathrm{CO}]/[^{13}\mathrm{CO}]$，它们大约在 60 ～ 90 之间[6]，所以

$$\frac{(1 - e^{-\tau(^{12}\mathrm{CO})})}{(1 - e^{-\tau(^{13}\mathrm{CO})})} \approx (1 - e^{-\tau(^{13}\mathrm{CO})})^{-1}$$

这样

$$\tau(^{13}\mathrm{CO}) \approx -\ln\left[1 - \frac{T_R^*(^{13}\mathrm{CO})}{T_R^*(^{12}\mathrm{CO})}\right] \tag{3.1.44}$$

不同分子的谱线光厚也可利用(3.1.38) 式直接导出，这样我们可得到^{13}CO$(1-0)$ 和 C^{18}O$(1-0)$ 的谱线光厚，如下式所示：

$$\tau(^{13}\mathrm{CO}) = -\ln\left\{1 - \frac{T_R^*(^{13}\mathrm{CO})}{5.29[J_1(T_{ex}) - 0.164]}\right\} \tag{3.1.45}$$

$$\tau(\mathrm{C^{18}O}) = -\ln\left\{1 - \frac{T_{\mathrm{R}}^{*}(\mathrm{C^{18}O})}{5.27[J_2(T_{\mathrm{ex}}) - 0.166]}\right\}$$

式中 $J_1(T) = 1/[\exp(5.29/T) - 1]$, $J_2(T) = 1/[\exp(5.27/T) - 1]$．在 3.1.2 节中，我们还曾导得，谱线光厚

$$\tau_\nu = \frac{c^2 g_{\mathrm{u}} A_{\mathrm{ul}}}{8\pi g_1 \nu^2} N_1 \left(1 - \mathrm{e}^{-\frac{h\nu}{kT_{\mathrm{ex}}}}\right) \phi(\nu) \qquad (3.1.46)$$

式中 $\phi(\nu)$ 为谱线轮廓函数，$\int \phi(\nu)\mathrm{d}\nu = 1$，和处理(3.1.34)式一样，用 N 替换 N_1，取配分函数 $Q(T) \approx kT_{\mathrm{ex}}/hB$，用电偶极矩 μ 求 A_{ul}，再将(3.1.46)式对整个频带积分，并考虑到

$$\int_{\Delta\nu} \tau_\nu \mathrm{d}\nu \approx \tau \cdot \Delta v \nu_0 / c, \text{（}\Delta v \text{ 为}{}^{13}\mathrm{CO}(1-0)\text{ 谱线的 FWHM 宽度）}$$

则可得到^{13}CO 分子的柱密度如下式[7]：

$$N(^{13}\mathrm{CO}) = 2.42 \times 10^{14} \times \frac{T_{\mathrm{ex}} \tau(^{13}\mathrm{CO}) \Delta v(^{13}\mathrm{CO})}{1 - \exp(-5.29/T_{\mathrm{ex}})} \mathrm{cm}^{-2} \qquad (3.1.47)$$

最后假定对C^{18}O的各种有关量，如 1 − 0 跃迁频率，爱因斯坦 A 系数均和^{13}CO 的一样，则还有下式[8]：

$$N(\mathrm{C^{18}O}) = 2.24 \times 10^{14} \frac{T_{\mathrm{ex}} \tau(\mathrm{C^{18}O}) \Delta v(\mathrm{C^{18}O})}{1 - \exp(-5.27/T_{\mathrm{ex}})} \mathrm{cm}^{-2} \qquad (3.1.48)$$

上二式中 T_{ex} 和 Δv 的单位均分别为 K 和 km · s^{-1}．对于^{12}CO 和^{13}CO 的大多数 $J = 1 - 0$ 跃迁来说上面的两条假设($T_{\mathrm{ex}} \approx T_{\mathrm{k}}$, $T_{\mathrm{ex}}(^{12}\mathrm{CO}) \approx T_{\mathrm{ex}}(^{13}\mathrm{CO})$)并不总是成立，但是上述的方法仍然作为标准方法之一，广泛用于分子云柱密度的确定．由于我们真正感兴趣的是 H_2 的柱密度，因此还必须完成 $N(^{13}\mathrm{CO})$ 和 $N(\mathrm{H_2})$ 间或者 $N(\mathrm{C^{18}O})$ 和 $N(\mathrm{H_2})$ 间的转换．正如分子天文历史上曾经做过的，第一步是找到 $N(^{13}\mathrm{CO})$ 和可见消光 A_v 间的关系．Dickman 发现对一些分子云有 $N(^{13}\mathrm{CO}) = 2.5 \times 10^{15} A_v$ mag · cm^{-2} 成立[9]．

Frerking 等(1982 年) 对金牛座和蛇夫座附近的分子云作了进一步研究,发现这一关系存在较大的局部变化[10]. 第二是利用消光和总氢柱密度 $N_{\rm H} = N({\rm H\,I} + 2{\rm H_2})$ 间关系(如由哥白尼卫星得到的 $A_{\rm v} = 4 \times 10^{-22} N_{\rm H}$),最后导得分子云柱密度

$$N({\rm H_2}) = (5.0 \pm 2.5) \times 10^5\, N({}^{13}{\rm CO}) \qquad (3.1.49)$$

严格地说,(3.1.49) 式只适于暗云. 近年来在计算各类分子云的氢分子柱密度时采用了较高的 $N({\rm H_2})/N({}^{13}{\rm CO})$ 比率($\sim 7 \times 10^5 \sim 10^6$)[11~13], 在计算 $N({\rm C^{18}O})$ 中采用的丰度比 $N({\rm H_2})/N({\rm C^{18}O})$ 大约是 7×10^6[12,14]. 可见 $\rm C^{18}O$ 在分子云中含量要比 $^{13}\rm CO$ 低得多,因此它是更光学薄的.

根据光薄情况下谱线亮温和光学厚度的近似关系 $T_{\rm R}^* \approx T_{\rm ex}\tau$, 而 $T_{\rm R}^* \Delta v \approx \int T_{\rm R}^* {\rm d}v$, 我们也可直接由观测到的谱线辐射温度的速度积分求出分子云的柱密度来[11],即

$$N({\rm H_2}) = 1.49 \times 10^{20} \times \frac{\int T_{\rm R}^*({}^{13}{\rm CO}){\rm d}v}{1 - \exp(-5.29/T_{\rm ex})}\,{\rm cm}^{-2} \qquad (3.1.50)$$

式中 $T_{\rm R}^*$ 和 $T_{\rm ex}$ 的单位为 K,dv 的单位为 km · s^{-1}. 相对(3.1.47)式,一个 6.2×10^5 的 $N({\rm H_2})/N({}^{13}{\rm CO})$ 比被采用了.

分子云柱密度得到后,很容易由分子云视线方向的尺度以及分子云在天球上的投影面积求出 LTE 下分子云的密度和质量. 假设所研究云的总质量为 $m_{\rm tot}$,则有

$$m_{\rm tot} = \mu m_{\rm H} \int_S N({\rm H_2}){\rm d}S = \mu m_{\rm H} \sum_i S_i N({\rm H_2})_i$$

S 是 $^{13}{\rm CO}(1-0)$ 或 ${\rm C\,^{18}O}(1-0)$ 发射在天球上的投影面积,$\mu = 2.8$ 是平均分子权重,$m_{\rm H}$ 是氢原子质量,S_i 是划分的小云块面积.

§3.2　统计平衡方程

由3.1.1和3.1.2节的讨论可知，分子谱线出射强度的计算与辐射源的源函数有关，与分子谱线的光厚有关．而S_ν和τ_ν又都取决于对应跃迁的分子能级布居数，也即分子按能级的数密分布．当局部热动平衡(LTE)不再保持时，或者说分子辐射区的源函数和激发温度不再分别满足普朗克函数和玻耳兹曼关系时，我们必须采用统计平衡方程来计算能级的布居数．

分子云与分子包层中分子能级的布居数$n_1, n_2, \cdots n_m, \cdots$是由分子能级间辐射跃迁和碰撞跃迁速率间的平衡来确定的．能级布居问题直接或间接地关系到大量分子能级的冗长而繁杂的计算．不仅如此，能级布居数方程还和与这些能级有关的所有谱线的辐射转移方程紧密耦合．从而构成了一个更大的难解的方程系统．为了便于讨论，便于较直观地分析能级分布(或者说相应定义的激发温度)在各种条件下的一些性质，本节首先从最简单的两能级系统出发，并且假设谱线本身辐射的光子能全部逸出分子云外．本节最后再给出多能级情况下分子能级布居数所满足的方程．在定态时这类方程也称统计平衡的速率方程或统计平衡方程．

3.2.1　两能级系统

1．不考虑辐射场的影响

假设分子仅有两个能量间隔为ΔE的孤立能级．符号"1"表示下能级，符号"2"表示上能级．相应的能级布居数分别记作n_1和n_2．如果我们忽略分子系统和外辐射场的相互作用，并假设谱线自发辐射的光子能全部逸出云外，则能级布居数的速率方程可表示成

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = \frac{-\partial n_2}{\partial t} = -n_1 C_{12} + n_2(A_{21} + C_{21}) \quad (3.2.1)$$

当系统达到平衡时则有下式成立，即

$$n_2(A_{21} + C_{21}) = n_1 C_{12} \quad (3.2.2)$$

此即两能级系统在满足上述条件时的统计平衡速率方程. 其中 C_{12} 和 C_{21} 是碰撞速率，分别表示某个分子在单位时间内，由"1"态碰撞激发到"2"态和由"2"态碰撞去激发到"1"态的概率. 通常碰撞去激发速率由下式计算，即

$$C_{21} = n\gamma_{21} = n\langle\sigma_{21}v\rangle \quad (3.2.3)$$

式中 γ_{21}（单位为 $cm^3 \cdot s^{-1}$）是由"2"态到"1"态的碰撞跃迁速率系数，σ_{21}（单位为 cm^2）是相应跃迁的碰撞截面，v 是碰撞粒子间的相对速度. $\gamma_{21} = \langle\sigma_{21}v\rangle$ 它代表对所有可能的从 $2 \rightarrow 1$ 碰撞能量的总平均. 如果该能量在运动温度 T_k 上服从麦克斯韦-玻耳兹曼分布，则

$$\gamma_{21} = \frac{4}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\mu}{2kT_k}\right)^{3/2}\int_0^{\infty}[\sigma_{21}(v)\cdot v]\cdot v^2\exp\left(-\frac{\mu v^2}{2kT_k}\right)dv \quad (3.2.4)$$

μ 是分子和与它相碰粒子的约化质量. 对中性-中性粒子碰撞，典型的 $\gamma_{21} = 10^{-11} \sim 10^{-10} cm^3 \cdot s^{-1}$ 间. 中性-带电粒子间的碰撞跃迁速率系数则大约为 $10^{-9}\ cm^3 \cdot s^{-1}$.

在分子云中主要考虑所研究分子与 H_2 分子之间的碰撞跃迁概率，有时也计及与 H、He 原子或者电子之间的碰撞. 无论从理论计算还是实验室测量来看，精确的各种分子与其它粒子间的碰撞速率的知识是比较缺乏的.

通常，在与氢分子碰撞情况下，归一化的碰撞去激发速率也可简单地由下式计算，即 $C_{21} = n(H_2)v_{H_2}\sigma$. 式中 $n(H_2)$ 为氢分子的数密度；v_{H_2} 为氢分子的平均热速度；σ 为某种分子与氢分子碰撞截面，非常近似时，甚至可用估计的几何横截面代替. C_{12} 和 C_{21} 关系

由气体运动温度 T_k来定义，即

$$g_1C_{12} = g_2C_{21}e^{-h\nu/kT_k} \tag{3.2.5}$$

当 $C_{21} \gg A_{21}$ 时，即碰撞跃迁占支配地位时，则 $n_2C_{21} \approx n_1C_{12}$，利用关系式(3.1.9)得

$$\frac{C_{12}}{C_{21}} \approx \frac{n_2}{n_1} = \frac{g_2}{g_1}e^{-h\nu/kT_{ex}}$$

与(3.2.5)式比较，立即有 $T_{ex} \approx T_k$.

所以在碰撞占绝对支配地位时，谱线激发温度等于气体运动温度，此时能级布居在运动温度上达到玻耳兹曼分布. 即

$$\left(\frac{n_2}{n_1}\right)_{thermal} = \frac{g_2}{g_1}e^{-h\nu/kT_k}$$

满足该条件的能级布居就叫"热布居"或"能级热化".

在更一般情况下，可由统计平衡方程(3.2.2)式直接导出上、下能级布居数之比，即

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{C_{12}}{C_{21} + A_{21}} \tag{3.2.6}$$

根据(3.2.5)式，则有

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{g_2}{g_1}\exp\left(-\frac{h\nu}{kT_k}\right)\frac{1}{1 + \frac{A_{21}}{C_{21}}} \tag{3.2.7}$$

当 $C_{21} \gg A_{21}$ 时，由(3.2.7)式得$\frac{n_2}{n_1} \approx \left(\frac{n_2}{n_1}\right)_{thermal}$ 和 $T_k \approx T_{ex}$. 由于碰撞速率正比于分子气体总密度 n，因此可定义一临界密度 n_{crit}，并让

$$\frac{n_{crit}}{n} = \frac{A_{21}}{C_{21}} \text{ 或 } n_{crit} = \frac{A_{21}}{\gamma_{21}} \tag{3.2.8}$$

(3.2.8)式给出了能级热化的一个尺度，即当气体密度 $n \gg n_{crit}$后能级将是热化的. 这一性质也适于多能级的情况. 根据谱线激发温度的定义，由(3.2.7)式可推得

$$T_{ex} = \frac{T_k}{1 + \left(\frac{kT_k}{h\nu}\right)\ln\left(1 + \frac{n_{crit}}{n}\right)} \tag{3.2.9}$$

若令 $n_{tot} = n_1 + n_2$，从(3.2.7)式还可以得到

$$\frac{n_2}{n_{tot}} = \frac{\frac{g_2}{g_1}\exp\left(-\frac{h\nu}{kT_k}\right)}{1 + \frac{g_2}{g_1}\exp\left(-\frac{h\nu}{kT_k}\right) + \frac{n_{crit}}{n}} \tag{3.2.10}$$

谱线热化过程也是气体密度不断增大以至超过临界密度的过程．当 $n \gg n_{crit}$ 时，(3.2.9)式还可近似写成

$$T_{ex} \approx T_k\left(1 + \frac{kT_k}{h\nu}\frac{n_{crit}}{n}\right)^{-1} \tag{3.2.11}$$

此时布居热化的条件是 $n \gg n_{crit}kT_k/h\nu$．因此温度越高，达到热化需要气体密度越大．图 3.2 展示的是在不同运动温度下，CO 的 $J = 1 - 0$ 跃迁能级热化的过程．由图可见，温度越高，达到完全热化，即 $T_{ex} = T_k$ 越慢．

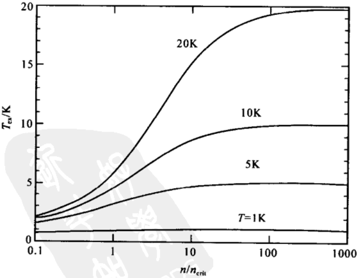


图 3.2 不同运动温下 CO 的 $J = 1 - 0$ 跃迁的能级热化过程[3]

在这个跃迁上 A 系数仅有 $7.4\times10^{-8}\,\mathrm{s}^{-1}$，小于类似频率典型转动跃迁的 A 系数. 相应的临界密度在典型的分子云温度上只有 $10^2\mathrm{cm}^3$左右. 可见 CO 的 $J=1-0$ 跃迁是比较容易热化的. 因此它一直被当作星际云的一个理想的测温计.

当 $n<n_{\mathrm{crit}}$ 时，我们称它为亚热布居情况. 此时由于自发辐射速率大于碰撞去激发速率，因此每一次从"1"→"2"的碰撞激发都将导致从"2"→"1"的自发光子发射. 在亚热布居情况下，上、下能级分子布居数之比

$$\frac{n_2}{n_1}=\left(\frac{n_2}{n_1}\right)_{\mathrm{thermal}}\left[\frac{1}{1+\dfrac{n_{\mathrm{crit}}}{n}}\right]\approx\left(\frac{n_2}{n_1}\right)_{\mathrm{thermal}}\left(\frac{n}{n_{\mathrm{crit}}}\right)\quad(3.2.12)$$

在亚热布居时，上能级的粒子布居数比热布居时减少. 由于激发温度是根据布居数比的关系定义的(见(3.1.9) 式)，所以亚热布居时相应的激发温度也降低.

下面我们来比较一下亚热和热布居情况时谱线的出射流量. 根据(3.2.8) 和(3.2.10) 式以及辐射流量定义，在一个简单两能级系统中，在光学薄情况下，谱线流量可以容易地表示成

$$F_{\mathrm{L}}=\frac{h\nu}{4\pi}A_{21}\Omega\int n_2\mathrm{d}z$$

$$n<n_{\mathrm{crit}}\ 时\qquad F_{\mathrm{L}}=\frac{h\nu}{4\pi}\gamma_{21}\Omega\frac{g_2}{g_1}\exp\left(-\frac{h\nu}{kT_{\mathrm{k}}}\right)\int n_{\mathrm{tot}}n\mathrm{d}z\propto n^2$$

$$n>n_{\mathrm{crit}}\ 时\qquad F_{\mathrm{L}}=\frac{h\nu}{4\pi}A_{21}\Omega\frac{g_2}{g_1}\exp\left(-\frac{h\nu}{kT_{\mathrm{k}}}\right)\int n_{\mathrm{tot}}\mathrm{d}z\propto N_{\mathrm{tot}}$$

式中 Ω 是源的立体角. 积分沿源的视线方向进行. 由上式可见，亚热情况下谱线流量正比于分子云的密度平方，而在热布居时却正比于分子云的柱密度(注：如果是光学厚必须对上式作改正，详见下一节).

在低密度的气体中，分子的丰度 $n_{\mathrm{tot}}/n(\mathrm{H_2})$ 对于其谱线发射流量是非常重要的. 如临界密度低，丰度高的 ^{12}CO 的低 J-mm 发射

就主要来自较低密度的延展的分子云包层.而具有高临界密度的丰度低的分子如CS或HCN则适于示踪高体积密度、高柱密度的分子云核,然而,那里的^{12}CO发射却是光厚和热化的.

2. 考虑辐射场的影响

当存在辐射场时,考虑到辐射场与分子系统的相互作用,统计平衡时的能级布居数速率方程变成如下形式:

$$n_1(C_{12}+B_{12}\overline{J})=n_2(C_{21}+B_{21}\overline{J}+A_{21}) \qquad (3.2.13)$$

$\overline{J}$是在谱线频率上的平均辐射场强度.严格讲它应由两部分组成:谱线本身(I_L)及背景的连续辐射场(I_{bg}),即

$$\overline{J}=\frac{1}{4\pi}\int_{4\pi}d\Omega(I_L+I_{bg}) \qquad (3.2.14)$$

这里我们仍然只考虑背景辐射场的贡献,而不计及谱线本身自发辐射光子被分子云或分子包层再吸收所带来的影响.也就是暂时只讨论光薄的情况.

在光薄情况下,很容易由速率方程(3.2.13)式导出能级布居数比n_2/n_1或者激发温度T_{ex}来.这里我们分两步来讨论.第一步先假设$\overline{J}$的主要贡献来自2.7 K宇宙背景辐射,而谱线本身自发辐射的光子几乎全部逸出星云外.

设$h\nu/k=T_0$,则 $C_{12}=\frac{g_2}{g_1}C_{21}e^{-T_0/T_k}$, 已知 $B_{21}=\frac{c^2}{2h\nu^3}A_{21}$, $B_{12}=\frac{g_2}{g_1}\frac{c^2}{2h\nu^3}A_{21}$,并考虑到$\overline{J}$主要指2.7 K($T_{BB}$)的微波背景辐射,则

$$\overline{J}=\frac{2h\nu^3}{c^2}(e^{\frac{h\nu}{kT_{BB}}}-1)^{-1} \qquad (3.2.15)$$

代入(3.2.13)式,两边除以n_1g_2/g_1,再利用$\frac{n_2g_1}{n_1g_2}=e^{-T_0/T_{ex}}$关系,我们得

$$C_{21}e^{-T_0/T_k}+\frac{A_{21}}{e^{T_0/T_{BB}}-1}$$

$$= e^{-T_0/T_{ex}}A_{21} + e^{-T_0/T_{ex}}\left(\frac{A_{21}}{e^{T_0/T_{BB}}-1}\right) + e^{-T_0/T_{ex}}C_{21}$$

$$e^{-T_0/T_{ex}} = \frac{C_{21}e^{-T_0/T_k} + \dfrac{A_{21}}{e^{T_0/T_{BB}}-1}}{A_{21} + \dfrac{A_{21}}{e^{T_0/T_{BB}}-1} + C_{21}}$$

经整理得

$$e^{-T_0/T_{ex}} = e^{-T_0/T_{BB}}\left[\frac{1+\dfrac{C_{21}}{A_{21}}(e^{T_0/T_{BB}}-1)e^{-T_0/T_k}}{1+\dfrac{C_{21}}{A_{21}}(1-e^{T_0/T_{BB}})}\right] \tag{3.2.16}$$

或者更直接的形式

$$\frac{T_0}{T_{ex}} = \frac{T_0}{T_k} + \ln\left[\frac{e^{T_0/T_{BB}} + \dfrac{C_{21}}{A_{21}}(e^{T_0/T_{BB}}-1)}{e^{T_0/T_k} + \dfrac{C_{21}}{A_{21}}(e^{T_0/T_{BB}}-1)}\right]$$

上两式也可用气体密度和临界密度之比来表示，如(3.2.16)式就可写成

$$e^{-T_0/T_{ex}} = e^{-T_0/T_{BB}}\left[\frac{1+\dfrac{n}{n_{crit}}(e^{T_0/T_{BB}}-1)e^{-T_0/T_k}}{1+\dfrac{n}{n_{crit}}(1-e^{-T_0/T_{BB}})}\right] \tag{3.2.17}$$

这样，只要知 A 系数和碰撞速率或者气体密度和临界密度以及运动温度，特定频率的谱线激发温度 T_{ex} 即可导出.

当 $A_{21} \gg C_{21}$ 或 $n_{crit} \gg n$ 时，为纯辐射激发情况. 由上面的式子可得到 $T_{ex} \approx T_{BB} = 2.7$ K. 该结果表明，在没有内部碰撞也没有外部其它辐射源时，谱线激发温度就是宇宙背景辐射的温度. 反之，若 $C_{21} \gg A_{21}$ 或 $n \gg n_{crit}$，则为纯碰撞激发. 同样由上面的几个式子立即可看出 $T_{ex} \approx T_k$. 即所谓谱线热化的情况.

除了宇宙背景辐射外，统计平衡方程中的 $\overline{J}$ 也可能来自分子系统外的其它辐射源，如恒星，HII 区和热尘埃的辐射等. 作为一个例子，假设分子云或分子包层被一个温度为 T_d 的热连续背景源所照明，且此连续辐射的光学厚度为 τ_d，由分子云看该源所张的立体角为 Ω_d，则由它贡献的平均辐射场为

$$\overline{J} = \frac{1}{4\pi}\int_{\Omega_d} I_{bg}\mathrm{d}\Omega = \frac{1}{4\pi}\left[\frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1-\exp(-\tau_d)}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT_d}\right)-1}\right]\cdot\Omega_d \tag{3.2.18}$$

类似 § 3.1 节所讨论，定义 $\tilde{T}_{eff}$ 为此连续背景源对整个立体角平均的等效瑞利 - 金斯辐射温度，它满足关系

$$\overline{J} = \frac{2k\nu^2}{c^2}\tilde{T}_{eff}$$

在两能级系统中，谱线源函数 S_L 可写成

$$S_L = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left(\frac{g_2 n_1}{g_1 n_2} - 1\right)^{-1} \tag{3.2.19}$$

n_1/n_2 关系由(3.2.13) 方程导出，这样

$$S_L = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left[\frac{g_2}{g_1}\left(\frac{A_{21}+B_{21}\overline{J}+C_{21}}{B_{12}\overline{J}+C_{12}}\right) - 1\right]^{-1} \tag{3.2.20}$$

类似地定义等效瑞利 - 金斯激发温度 $\tilde{T}_{ex}$，它满足关系

$$S_L = \frac{2k\nu^2}{c^2}\tilde{T}_{ex}$$

将(3.2.20) 式代入，并考虑到 $\frac{C_{21}}{A_{21}} = \frac{n}{n_{crit}}$ 即得

$$\tilde{T}_{ex} = \frac{\tilde{T}_{eff} + \left(\frac{h\nu}{k}\right)\left(\frac{n}{n_{crit}}\right)}{1 + \left(\frac{n}{n_{crit}}\right)\left(\frac{h\nu}{k\tilde{T}_k}\right)} \tag{3.2.21}$$

式中 $\tilde{T}_k$ 满足(3.1.16) 式的关系，即

$$\tilde{T}_{k}=\frac{h\nu}{k}\left[1-\exp\left(\frac{h\nu}{kT_{k}}\right)\right]^{-1}$$

方程(3.2.21)是在谱线光薄情况下，碰撞与辐射激发同时存在时的谱线等效激发温度的计算公式*. 在满足瑞利 - 金斯条件下($h\nu/kT\ll 1$)，则$\tilde{T}_{ex}\rightarrow T_{ex}$，$\tilde{T}_{eff}\rightarrow T_{eff}$，$\tilde{T}_{k}\rightarrow T_{k}$. 对于纯辐射激发情况(也即$n\ll n_{crit}$，可近似认为$n\rightarrow 0$)，则和(3.1.17)式讨论过的宇宙背景辐射时的情况一样，此时有

$$\tilde{T}_{ex}=\tilde{T}_{eff} \tag{3.2.22}$$

对于$n=n_{crit}$和$h\nu/k>\tilde{T}_{eff}$，有

$$\tilde{T}_{ex}=\frac{\tilde{T}_{eff}+\left(\frac{h\nu}{k}\right)}{1+\left(\frac{h\nu}{k\tilde{T}_{k}}\right)}\approx\left[\left(\frac{h\nu}{k}\right)^{-1}+\tilde{T}_{k}\right]^{-1} \tag{3.2.23}$$

此式表明在$n=n_{crit}$时，分子的红外跃迁要比射电 /mm 跃迁有相对高的激发温度. 分子谱线的辐射激发的例子很多，如大质量恒星形成区 Orion-KL 中 OH 分子的远红外激发和 HCN 分子的振动激发.

3.2.2　多能级系统

两能级模型是一种简单模型. 实际问题中任何一个能级上分子布居数密度均和它上下许多能级的布居数以及它们之间的跃迁过程有关. 因此必须考虑多能级的统计平衡问题. 我们可以很容易地将方程(3.2.2)推广到多能级情况. 此时，对某一个能级，比如说j能级，在不计及谱线本身光子俘获时(即光学薄情况)，其统计

---

* 事实上，此处的激发温度T_{ex}也可用(3.2.16)或(3.2.17)式来计算，计算时只要将式子中的T_{BB}换成T_{eff}就可以了.

平衡方程表示如下：

$$n_j\Big[\sum_{i\neq j}(C_{ji}+R_{ji})+\sum_{i<j}A_{ji}\Big]=\sum_{i\neq j}n_i(C_{ij}+R_{ij})+\sum_{i>j}A_{ij}n_i$$

$$(i=1,2,3,\cdots,i_{max}) \tag{3.2.24}$$

方程左方表示所有离开 j 能级导致该能级布居数减少的过程，而右方则是所有进入 j 能级使该能级布居数增加的过程. 同前述，方程中 A_{ji}和 A_{ij}是爱因斯坦自发辐射跃迁概率；C_{ji}和 C_{ij} 是碰撞跃迁概率；n_i和 n_j 分别是能级 i 和 j 上的分子数密度，$i>j$ 意味着相应能级的能量 $E_i>E_j$；R_{ji} 和 R_{ij} 则表示受激跃迁（吸收或者发射）概率. 有下式成立，即

$$R_{ij}=B_{ij}\bar{J}=B_{ij}\frac{1}{4\pi}\int_{4\pi}\mathrm{d}\Omega(I_{\mathrm{L}}+I_{\mathrm{c}}) \tag{3.2.25}$$

B_{ji}和 B_{ij} 是爱因斯坦受激辐射跃迁系数.（3.2.25）式中的 I_{L} 和 I_{c} 分别表示在谱线频率附近积分的谱线和连续谱的平均辐射场. 选择 $j=1,2,3,\cdots,j_{max}$（通常 $j_{max}=i_{max}$），可以得到一套形式和（3.2.24）式一样的方程组. 对于一组已知的参数，如 n，T_{k}，I_{c} 等可以通过矩阵的反转解出各个能级的分子数密 n_1，n_2，…，n_{jmax} 来.

当谱线本身的强度对分子云或分子包层中的平均辐射场产生一个重要贡献时（也即谱线光子不能全部逸出云外时），情况变得复杂起来. $\bar{J}$ 中包含分子本身跃迁引起的辐射场后，$\bar{J}$ 将与 I_ν 有关，而 I_ν 只有通过求解谱线的辐射转移方程才可导出. 反过来，求解 I_ν 又与分子能级布居数 n_1，n_2，… 有关（其隐含在辐转方程的 j_ν 和 K_ν 中），这样就必须联立求解辐射转移和统计平衡方程. 或者说此时方程（3.2.24）变成非线性的了，只有用迭代的方法才可求解它们.

§3.3　逃逸概率方法

3.3.1 谱线俘获和逃逸概率的引入

至此，我们讨论的均是谱线光子不被俘获而全部能逸出云外的情况. 此时云中的平均辐射场 $\overline{J}$ 全部由分子系统外部的辐射源所贡献. 这样只要 $\overline{J}$ 得知，原则上可以通过求解统计平衡方程(3.2.24)得到任意数目的分子能级布居数. 然而这只是一种理想情况. 实际问题中总有相当一部分的分子，其发射的谱线光子在源中传输时会被其它分子吸收或引起受激再发射. 特别在光学厚情况下，发射的谱线光子被吸收后又因碰撞去激发而返回原态，因此它们不可能再贡献于任何的光子发射，也就是说此时光子逸出云的概率为零.

考虑到谱线俘获效应后，从概念上来理解，带来的影响主要有：

(1) 在谱线的辐射转移和能级的统计平衡中必须考虑谱线光子本身对平均辐射场 $\overline{J}$ 的贡献. 如果假设 β 是光子逸出云(即分子辐射源区)的概率，则

$$\overline{J} = S(1-\beta) \tag{3.3.1}$$

式中 S 是辐射源区的局部源函数.

(2) 谱线最终的发射强度

在光薄时　$I \sim n_u V A h\nu$

在光厚时　$I \sim n_u V A \beta h\nu \qquad (3.3.2)$

式中 V 是分子源的体积. 因此"谱线俘获"效应在本质上是用逃逸概率 $\beta(\tau)$ 重新调节了自发发射速率，即爱因斯坦系数

$$A \rightarrow A \cdot \beta(\tau) \approx A/(\alpha\tau) \tag{3.3.3}$$

式中 α 是量级为 1 的数值因子.

如前节所述，考虑谱线本身光子对 $\overline{J}$ 影响后，为求得分子按能级的数密度分布和谱线的出射强度，必须同时求解所有能级的布居数方程和连接这些能级的所有允许的谱线跃迁的辐转方程. 这当然是一个相当复杂的问题. 逃逸概率引入就是要设法将统计平衡方程从谱线的辐射转移问题中解耦出来. 它是处理谱线问题的一个极有效的近似方法. 逃逸概率思想是 Sobolev(1958 年) 在处理膨胀大气辐射转移问题时第一次引入的，以后人们又将它推广到许多其它的物理系统. 由于在源中不断发生光子的吸收和再发射，谱线光子将在整个源中漫游，故采用局部的逃逸概率因子仅是一种近似. 然而，这种近似的处理结果与更精确的辐射转移解相比，只要应用得当结果是相当一致的.

导出(3.3.3) 式的关系和逃逸概率 β_{ij} 的计算公式的方法很多，下面介绍一种比较直观和简单的办法，它也是从物理概念上着手的.

首先我们来讨论考虑分子谱线本身辐射被吸收时分子能级的布居数速率方程. 若仍只涉及两个能级 i 和 j，则对于 i 能级分子布居数的变化速率

$$\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t} = - A_{ij}n_i - B_{ij}\overline{J}_{ij}\left(n_i - n_j\frac{g_i}{g_j}\right) + \text{碰撞项} \quad (3.3.4)$$

假定外辐射场为零，则在这里 $\overline{J}$ 仅是由 $i \rightarrow j$ 谱线辐射本身贡献的平均辐射场强度. 在各向同性情况下，$\overline{J} = I_{ij}$，按辐射转移理论，I_{ij} 应与源函数 S_{ij} 有关. 通常分子自身的辐射只有一部分会被分子源区，如分子云或分子包层再吸收，从而影响分子按能级的布居分布，而分子自发发射的其它部分将逃逸出云外.

现在我们用 β_{ij} 表示逃逸出源区那部分辐射的概率(或者说在一个云中一个发射光子直接逃逸的概率)，这样在云中

$$I_{ij} \approx (1 - \beta_{ij})\, S_{ij} \quad (3.3.5)$$

代入方程(3.3.4)，同时考虑到

$$S_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\dfrac{n_i g_j}{n_j g_i} - 1}$$

和

$$g_j B_{ji} = g_i B_{ij}, A_{ij} = B_{ij} \frac{2h\nu^3}{c^2}$$

我们立即可导出

$$\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t} = - n_i A_{ij} \beta_{ij} + \text{碰撞项} \tag{3.3.6}$$

这样，只要找到 β_{ij}，可不用解辐射转移方程求 I_{ij}，而直接由速率方程（或者统计平衡方程）求出分子布居数 n_i，n_j 来.

由方程(3.3.6)可见，每一个自发跃迁的光子，并不都引起能级布居数的改变. 仅仅是那些逃逸出去的光子，使上能级粒子布居数减少，这是由于某些发射光子又被源中其它分子所吸收，以使分子出现在上能级上的概率不变. 最后净速率的变化由 $n_{ij} \cdot A_{ij}$ 乘以系数 β_{ij} 来决定. 引入 β 使自发发射和由谱线本身发射引起的感应吸收（或发射）结合成一项，使求解大大简化.

如何确定 β? 设想有一个强度为 I 的辐射进入一个光深为 τ 的介质，则出口处的辐射强度为 $I \cdot \mathrm{e}^{-\tau}$. 这里相对进入的辐射，其逃逸概率即为 $\mathrm{e}^{-\tau}$. 对于来自源内部的辐射，我们无法定出产生辐射的准确位置，为此，我们通过对整个光厚求平均来求出 β，这样得到的是平均逃逸概率，即

$$\langle \beta \rangle = \langle \mathrm{e}^{-\tau} \rangle = \frac{\int_0^\tau \mathrm{e}^{-t} \mathrm{d}t}{\int_0^\tau \mathrm{d}t} = \frac{1 - \mathrm{e}^{-\tau}}{\tau} \tag{3.3.7}$$

当光厚增加时，逃逸概率 β 减小.

当　$\tau \gg 1$ 时，　$\beta \sim \frac{1}{\tau}$　　（光厚情况）

当　$\tau \ll 1$ 时，　$\beta \to 1$　　　（光薄情况）

如果 τ 依赖方向，则

$$\beta = \frac{1}{4\pi}\int \frac{1-\mathrm{e}^{-\tau}}{\tau}\mathrm{d}\Omega \tag{3.3.8}$$

逃逸概率不仅取决于云的几何学，还与源区的速度场或者说运动学结构有关.

3.3.2　均匀的具有高斯谱线轮廓的球形或平板形静止介质中逃逸概率的计算

上面给出的计算逃逸概率的方法不是精确的处理. 但是它反映了精确处理的精华. 在多种计算中 β 的差别与特定模型下对逃逸因子 $\exp(-\tau)$ 的求平均方法有关. 这里我们介绍最常见的两种情况下的逃逸概率的计算. 有兴趣的读者还可参阅参考资料[2～4,15～18]等.

我们首先来讨论一个均匀的具有高斯谱线轮廓的球形或平行平面形静止介质中逃逸概率的计算. 这里所谓静止介质指只存在气体间随机的高斯型的热运动或湍动运动，而不存在任何整体的系统运动.

根据(3.2.25)式，在不考虑外界连续辐射源贡献时，分子的受激辐射跃迁概率为

$$R_{ij} = B_{ij}\bar{J} = B_{ij}\frac{1}{4\pi}\int_{4\pi}\mathrm{d}\Omega I_{\mathrm{L}} \tag{3.3.9}$$

在一个均匀的球形或平板形的辐射源中，可以认为各处的源函数 S 近似相等. 将(3.1.12)式代入上式可得

$$R_{ij} = B_{ij}\int\frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi}\int\mathrm{d}\nu\phi(\nu-\nu_0)\{I_{\mathrm{bg}}\exp[-\tau(z)] + S[1 - \exp(-\tau_\nu(z))]\} \approx B_{ij}I_{\mathrm{bg}}\beta + B_{ij}S(1-\beta) \tag{3.3.10}$$

式中 $\phi(\nu-\nu_0)$ 为高斯型轮廓（或称多普勒轮廓）函数：

$$\phi(\nu-\nu_0)=\frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta\nu_D}e^{\left(-\frac{\nu-\nu_0}{\Delta\nu_D}\right)^2} \tag{3.3.11}$$

这样,在一具有高斯谱线轮廓的均匀介质中其逃逸概率可写成

$$\beta(\tau_1)=\int\frac{d\Omega}{4\pi}\int d\nu\phi(\nu-\nu_0)\,e^{-\tau_1\phi(\nu-\nu_0)} \tag{3.3.12}$$

式中τ_1是按谱线积分的光学深度(即,$\tau_1=\int\tau_\nu d\nu$).如果沿着球形云的半径或平行平面云的法向进行计算的话,该τ_1等于线心处光深τ_0的$\sqrt{\pi}$倍.若谱线出射强度的方向与上述方向成θ角时,则沿此方向的光学深度是τ_1/μ,$\mu=\cos\theta$,按谱线轮廓,平均的逃逸概率是

$$\beta(\tau_1)=\int\frac{d\Omega}{4\pi}\int d\nu\phi(\nu-\nu_0)\,e^{-\tau_1\phi(\nu-\nu_0)/\cos\theta} \tag{3.3.13}$$

$\beta(\tau_1)$是在源内部谱线光子从光学厚度为τ_1的位置上逃逸出源的概率,因此,它是一个局部的逃逸概率.在源函数为常数的假设下它与辐射场的强度无关.(3.3.13)式中的$d\Omega=2\pi\sin\theta d\theta$,令$\phi_\nu=\phi(\nu-\nu_0)$,$\mu=\cos\theta$,且只考虑来自特定光深上的一侧的逃逸概率,则

$$\beta(\tau_1)=\frac{1}{2}\int_0^{\infty}\phi_\nu\int_0^{+1}e^{-\tau_1\phi_\nu/\mu}d\mu d\nu=\frac{1}{2}\int_0^{\infty}\phi_\nu\int_1^{\infty}e^{-\tau_1\phi_\nu z}\frac{dz}{z^2}d\nu$$

$$=\frac{1}{2}\int_0^{\infty}\phi_\nu E_2(\tau_1\phi_\nu)d\nu$$

式中$z=1/\mu$.若用一个无量纲频率x替代谱线轮廓函数中的变量$(\nu-\nu_0)/\Delta\nu_D$,让τ表示对谱线多普勒轮廓求平均的光学深度,则$\tau=\tau_1/\Delta\nu_D$.注意到$\phi(x)dx=\phi_\nu d\nu$,则$\phi(x)=\phi_\nu\Delta\nu_D$,这样,(3.3.13)式还可写成

$$\beta(\tau)=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x)dx\int_0^{+1}e^{-\tau\phi(x)/\mu}d\mu$$

或写成
$$\beta(\tau)=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x)E_2(\tau\phi(x))\mathrm{d}x \tag{3.3.14}$$

式中$\phi(x)=(\pi)^{-1/2}\exp(-x^2)$. 当 $\tau\phi(x)\gg 1$ 时,$E_2(\tau)\approx 0$,相应于线核附近光子被吸收或发射情况. 反之,$\tau\phi(x)\ll 1$ 时,$E_2(\tau)\approx 1$,说明线翼处大部分光子逃逸[4]. 取无量纲频率为x_1时,$\tau\phi(x_1)=1$,并假设在 $|x|<x_1$ 的任何频率上,没有光子逃逸,这样

$$\beta(\tau)\approx\int_{x_1}^{\infty}\phi(x)\mathrm{d}x$$

对于多普勒致宽有(3.3.11)式,或写成

$$\phi(x)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-x^2}$$

则

$$\mathrm{e}^{-x_1^2}=\frac{\sqrt{\pi}}{\tau},x_1=\sqrt{\ln\left(\frac{\tau}{\sqrt{\pi}}\right)}$$

$$\beta(\tau)\approx\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{x_1}^{\infty}\mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x\approx\frac{\mathrm{e}^{-x_1^2}}{2\sqrt{\pi}\,x_1}$$

若$\tau\gg 1$,将x_1的值代入上式得

$$\beta(\tau)\approx\frac{1}{2\tau}\frac{1}{\sqrt{\ln\left(\frac{\tau}{\sqrt{\pi}}\right)}} \tag{3.3.15}$$

β 的数值作为 τ 的一个函数(见(3.3.14)式)已经由 Ivanov 和 Sherbakov 列表表示[19]. de Jong 等[15] 计算了光薄和光厚情况下逃逸概率的近似表达式,发现

当 $\tau<7$ 时, $\beta(\tau)\approx\dfrac{1-\exp(-2.34\tau)}{4.68\tau}$

当 $\tau\geqslant 7$ 时, $\beta(\tau)\approx\dfrac{1}{4\tau}\dfrac{1}{\sqrt{\ln\left(\frac{\tau}{\sqrt{\pi}}\right)}}$

3.3　具有大速度梯度的运动介质的逃逸概率计算

根据定义，光学厚度 $\tau_\nu = \int \kappa_\nu \mathrm{d}s$. 假定在路径 Δl 内，净吸收系数变，则由(3.1.5)，(3.1.7)式得

$$\tau_{ij} = \left(n_j - n_i \frac{g_j}{g_i}\right) \frac{B_{ji}}{4\pi} h\nu\phi(\nu)\Delta l = \left(n_j - n_i \frac{g_j}{g_i}\right) \frac{B_{ji}}{4\pi} h\nu \frac{\Delta l}{\Delta \nu}$$

多普勒频移关系知：

$$\tau_{ij} = \left(n_j - n_i \frac{g_j}{g_i}\right) \frac{B_{ji}}{4\pi} hc \left(\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}l}\right)^{-1} \qquad (3.3.16)$$

是辐射源所在处的速度场梯度. 由上式可知，在其它因素一定，谱线光厚与速度场梯度成反比.

由于逃逸概率与谱线光厚有关，因此在有系统运动情况下，逃概率还与源区的速度场梯度或者说运动学结构有关. 逃逸概率法特别适于处理有系统速度场梯度的运动介质中的辐射转移，经常被使用的一种方法. 事实上，逃逸概率的思想正是在处理膨大气的辐射转移问题时被 Sobolev 第一次引入的. 以后 Castor 利用逃逸概率方法，详细计算了迅速径向膨胀的拱星包层中的线出射流量和轮廓. 我们将在膨胀大气谱线形成一节中详细讨在 Sobolev(即大速度梯度）局域近似模型下谱线形成的具体机这一节我们仅给出大速度梯度近似下的逃逸概率的计算.

大速度梯度模型近似的主要思想是：

在一个局部区域中产生的辐射只与局部的分子和原子发生相作用，此相互作用区域的尺度 $\Delta l = \Delta v / \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}l}$，式中 Δv 为运动介质气体的局部热运动或湍动运动的速度宽度，$\mathrm{d}v/\mathrm{d}l$ 为系统运动介的速度场梯度. 这样，一个已知频率为 ν 的辐射只能在运动介质的一个速度 v 满足 $|\nu - \nu_0(1 + v/c)| \leqslant \Delta\nu_{\mathrm{D}}$(或 $\Delta\nu_{\mathrm{turb}}$：湍动）的

特定区域中产生.

现在仍假设一个两能级系统,那么在这个区域中分子能级的布居数速率方程(以上能级为例)在不考虑外部辐射场时可写成

$$\frac{dn_u}{dt} = -n_u A + \left(n_l - \frac{n_u}{g_u} g_l\right) \frac{B_{lu}}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{4\pi} I(\nu) d\Omega \phi(\nu, 0) d\nu \tag{3.3.17}$$

这里先假设该局部区域的 $v=0$,因此 $\phi(\nu, v) = \phi(\nu, 0)$. 然后将发射系数和吸收系数的关系式代入式中的辐射场强度 $I(\nu)$,并令

$$\alpha = \left(n_l - \frac{n_u}{g_u} g_l\right) \frac{B_{lu}}{4\pi}$$

上式变为

$$\begin{aligned} \frac{dn_u}{dt} &= -n_u A + \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \int_{4\pi} \int_0^{\infty} n_u A \frac{h\nu}{4\pi} \phi(\nu, v) dl \cdot e^{-\int_0^l \alpha h\nu\phi(\nu, v) dl} d\Omega \phi(\nu, 0) d\nu \\ &= -n_u A + \frac{n_u A}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{4\pi} \int_0^{\infty} (-) \frac{d}{dv} e^{-\int_0^v \alpha h\nu\phi(\nu, v') \frac{dl}{dv'} dv'} dv d\Omega \phi(\nu, 0) d\nu \\ &= -n_u A + \frac{n_u A}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{4\pi} \left[1 - e^{-\int_0^{\infty} \alpha h\nu\phi(\nu, v') \frac{dl}{dv'} dv'}\right] d\Omega \phi(\nu, 0) d\nu \\ &= -\frac{n_u A}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{4\pi} \phi(\nu, 0)\, e^{-\int_0^{\infty} \alpha h\nu\phi(\nu, v') \frac{dl}{dv'} dv'} d\Omega d\nu \end{aligned} \tag{3.3.18}$$

如前所述,谱线发射的有效速率等于被光子逃逸概率 β 修正了的自发发射速率,即

$$\frac{dn_u}{dt} = -n_u A \beta$$

因此

$$\beta = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{4\pi} \phi(\nu, 0) e^{-\int_0^{\infty} \alpha h\nu\phi(\nu, v') \frac{dl}{dv'} dv'} d\Omega d\nu \tag{3.3.19}$$

当 $v'=0$ (静止介质) 时,与上节(3.3.12) 式结果一致. 在存在系

统运动($v' \neq 0$)情况下,谱线中心频率因多普勒效应移动至 $\nu_0\left(1+\frac{v'}{c}\right)$ 处. 此时谱线的多普勒轮廓为

$$\phi(\nu, v') = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta\nu_D} e^{-\left[\frac{\nu-\nu_0(1+v'/c)}{\Delta\nu_D}\right]^2} \qquad (3.3.20)$$

令

$$p(\nu) = \int \phi(\nu, v') \mathrm{d}v'$$

则

$$\frac{\mathrm{d}p(\nu)}{\mathrm{d}\nu} = \int_0^\infty \frac{\partial \phi(\nu, v')}{\partial \nu} \mathrm{d}v'$$

$$= \int_0^\infty \frac{\partial \phi(\nu, v')}{\partial v'} \cdot \frac{1}{\left(-\frac{\nu_0}{c}\right)} \mathrm{d}v'$$

$$= \frac{c}{\nu_0} \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta\nu_D} e^{-\left[\frac{\nu-\nu_0}{\Delta\nu_D}\right]^2} = \frac{c}{\nu_0}\phi(\nu, 0)$$

代入(3.3.18)式,得

$$\frac{\mathrm{d}n_u}{\mathrm{d}t} = -\frac{n_u A}{4\pi} \int_0^{c/\nu_0} \int_{4\pi} e^{-\alpha h\nu \frac{\mathrm{d}l}{\mathrm{d}v} p(\nu) \left(\frac{\nu_0}{c}\right)} \mathrm{d}p \mathrm{d}\Omega$$

由于光学厚度 $\tau = \alpha h\nu(\mathrm{d}l/\mathrm{d}v)\ (c/\nu_0)$,所以

$$\frac{\mathrm{d}n_u}{\mathrm{d}t} = -\frac{n_u A}{4\pi} \int_{4\pi} \frac{1-e^{-\tau}}{\tau} \mathrm{d}\Omega$$

则逃逸概率

$$\beta = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \frac{1-e^{-\tau}}{\tau} \mathrm{d}\Omega \qquad (3.3.21)$$

该式与3.3.1节从概念着手导出的(3.3.8)式完全一致. 当在球形几何学下,观测方向与径向不一致时,与上一节讨论一样,可引入变量 μ 和 σ, 并令 $\mu = \cos\theta$ (θ 为视线方向与径向的夹角),$\sigma = \frac{r}{v}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r} - 1 = \frac{\mathrm{d}\ln v}{\mathrm{d}\ln r} - 1$, $\mathrm{d}v/\mathrm{d}r$ 为运动介质径向方向的速度场梯度. 可以证明,此时光学厚度与 μ 有关(详见第3.4.2节),即

$$\tau(\mu) = \frac{\tau_0}{1+\sigma\mu^2}$$

式中 τ_0 为线心处的光学厚度：

$$\tau_0 = \frac{r}{v}\frac{c}{\nu_0}\frac{h\nu}{4\pi}(n_l B_{lu} - n_u B_{ul})$$

而逃逸概率

$$\beta = \int\frac{d\Omega}{4\pi}\cdot\frac{1-\exp[-\tau(\mu)]}{\tau(\mu)} = \frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}\frac{1-\exp[-\tau(\mu)]}{\tau(\mu)}d\mu \tag{3.3.22}$$

由以上讨论可明显看出，在运动介质情况下，逃逸概率与速度场分布、观测方向密切相关. 除非在 $\sigma = 0$ $(dv/dr = v/r)$ 时，(3.3.22) 式中 β 与 μ 的依赖关系才消失. 当 β 与方向无关时，逃逸概率可简单表示成

$$\beta = \frac{1-e^{-\tau}}{\tau}$$

逃逸概率的引入特别适于研究处理具有速度梯度的径向运动（膨胀、塌缩或转动）时的辐射转移，在分子云和拱星包层中经常用到. 由(3.3.22) 式知，β 与 τ 有关，而 τ 又与速度梯度成反比. 但需要说明的是(3.3.16) 式中的速度梯度是沿视线方向而言的，因此在等速径向膨胀（或塌缩）时，速度梯度并不一定为零. 如取 z 为视线方向，在等速膨胀时，速度梯度 $dv_z/dz \sim v/r$，v 是运动介质的膨胀速度，r 是球半径. 显然 v 越大(r 一定时) 速度梯度越大. 按大速度梯度模型，当速度场梯度足够大时，相互作用区域的尺度将变得非常小，以致于可以认为在相互作用区内分子源的所有物理特性基本相同，在这个时候逃逸概率方法将是一种极好的近似.

3.3.4 引入逃逸概率后分子能级布居数的计算

逃逸概率方法引进后，使我们能直接地将辐射转移效应合并到能级布居数的速率方程中去，只要对方程中的自发发射速率简单地乘以逃逸概率 β 就可以了．这样在不考虑外辐射源时，两能级情况的能级布居数方程(3.2.7)式就变为

$$\frac{n_i}{n_j}=\frac{g_i}{g_j}\exp\left(-\frac{h\nu}{kT_k}\right)\frac{1}{1+\dfrac{\beta_{ij}A_{ij}}{C_{ij}}}=\frac{g_i}{g_j}\exp\left(-\frac{h\nu}{kT_k}\right)\frac{1}{1+\beta_{ij}\dfrac{n_{crit}}{n}} \tag{3.3.23}$$

显然，当 $\beta\approx1$ 时，(3.3.23)式返回到光薄情况下的(3.2.7)式．然而当源是光厚的，即 $\beta\approx\frac{1}{\tau}$ 时，辐射源的有效临界密度将显著下降．因此对于光学厚的谱线，在低密下就可实现热化，或者说原来在光薄下的亚热谱线($n_{crit}>n$)在光厚下可能变成热化的谱线($n_{crit}<n$)．

至此我们可以解决所有环境下的能级布居问题．然而由于逃逸概率 β 与光深 τ 有关，τ 又与能级布居数 n_1,n_2 有关，因此求解上述的两能级方程时，方程两边都是能级布居数的函数．可见 β 的引入虽然可以撤除一个谱线辐射转移方程，但是必须以求解一个非线性方程为代价．好在这类非线性方程仍属于简单的代数方程，我们可以利用数值方法如牛顿迭代法来求解它们．

逃逸概率方法也可用于描述外来源和谱线发生区之间的相互作用．假设一个由外部源发出的光子到达云内部特定点的概率等于在该点发生同样频率光子逃逸出云的概率．这样，在存在外部辐射场 $J_\tau(\nu_{ij})$时，在速率方程中必须加入如下的一项，即

$$\beta_{ij}B_{ij}J_\tau(\nu_{ij})\left(n_i-n_j\frac{g_i}{g_j}\right) \tag{3.3.24}$$

其中

$$J_r(\nu_{ij}) = \frac{1}{4\pi}\int d\Omega I_r(\nu_{ij}) \qquad \text{对于均匀源}$$

$J_r = I_r(\Delta\Omega_r/4\pi)$，$I_r$ 为外部辐射强度，$\Delta\Omega_r$ 为外部源立体角. I_r 通常可用普朗克函数描述，对应等效黑体温度 T_r. 令 $W=\Delta\Omega_r/4\pi$，W 也可称作稀释因子，它是由几何效应引起的. 设 R 为外部源半径，r 为分子辐射源处的半径（见图 3.3），则 r 处看到的外部源立体角为

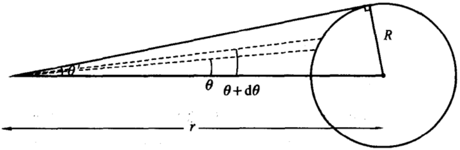


图 3.3[4]

$$\Delta\Omega_r = 2\pi\int_0^{\theta'}\sin\theta d\theta = 2\pi(1-\cos\theta') = 2\pi\left(1-\sqrt{1-\frac{R^2}{r^2}}\right)$$

$$W=\frac{\Delta\Omega_r}{4\pi}=\frac{1}{2}\left(1-\sqrt{1-\frac{R^2}{r^2}}\right) \tag{3.3.25}$$

如果 $r\gg R$，则 $W\approx R^2/(4r^2)$，即外部辐射随距离平方按反比的关系衰减. 这样，(3.3.24)式可写成如下形式：

$$\frac{W\beta_{ij}A_{ij}(n_i-n_jg_i/g_j)}{\exp(h\nu_{ij}/kT_r)-1}$$

上式中的 T_r 可以是背景星的辐射温度，也可以是尘埃的等效黑体温度，2.7 K 微波背景或者 HII 区的射电连续辐射温度等，如何选取视问题的物理环境而定.

此外，当我们把云中求谱线光子逃逸概率方法推广到外部源时，常认为外部源发出的光子到达云中特定点的几率 β_c 和云中该

点光子逃逸出云的概率 β 一样. 但严格说,这两种概率并不相等,即

$$\beta = \frac{1}{2}\int_{-1}^{+1} \frac{1 - e^{-\tau}}{\tau} d\mu$$

而

$$\beta_c = \frac{1}{2}\int_{\mu_c}^{+1} \frac{1 - e^{-\tau}}{\tau} d\mu \tag{3.3.26}$$

μ_c 是对着外部源如恒星张角的余弦,有

$$\mu_c = \left[1 - \left(\frac{R_*}{R}\right)^2\right]^{1/2} \tag{3.3.27}$$

R_* 是外部源的半径,R 是该点到源的距离. 关于 β 和 β_c 的详细计算可参阅参考资料[20].

逃逸概率的引入使联立求解辐射转移和统计平衡方程的问题蜕化为解一个方程即统计平衡方程(或速率方程). 在存在碰撞和外部辐射的情况下,对于 i 能级速率方程的完整形式如下[21,22]:

$$\begin{aligned}\frac{dn_i}{dt} = &- \sum_{j<i} \Big\{ A_{ij}\beta_{ij}n_i + B_{ij}\beta_{ij}I_{ij}(n_i - n_j) + \\ &C_{ij}\Big[n_i - n_j\exp\Big(-\frac{h\nu_{ij}}{kT_k}\Big)\Big]\Big\} + \sum_{j>i} \frac{g_j}{g_i}\Big\{ A_{ji}\beta_{ji}n_j + \\ &B_{ji}\beta_{ji}I_{ji}(n_j - n_i) + C_{ji}\Big[n_j - n_i\exp\Big(-\frac{h\nu_{ij}}{kT_k}\Big)\Big]\Big\} \\ &(i, j = 1, 2, \cdots, n_{\max})\end{aligned} \tag{3.3.28}$$

其中 A_{ij},B_{ij}是爱因斯坦辐射跃迁概率,C_{ij}是碰撞跃迁概率,β_{ij}是逃逸概率. 当外部源是均匀源时,可以用辐射场强度来替代统计平衡方程中的平均辐射场. I_{ij}就是在频率 ν_{ij}(相应从能级 i 跃迁到能级 j)上外辐射场强度.

在方程(3.3.28)中假设能级是按序排列的. 此外由于要服从总粒子数守恒关系,因此必有下式成立,即

$$\sum_i g_i n_i = n_{mol} \tag{3.3.29}$$

n_{mol}是所研究分子的总数密度. 在定态时则有 $dn_i/dt=0$,能级布居数将通过解一套代数方程得到,而无需求解辐射转移方程. 与两能级的道理一样,这些方程都是非线性的,通常只有用数值方法解它们. 在解这些方程时,一个方便的方法是用相对布居数 n_i/n_{mol}(注:下面我们就称它为 n_i)进行计算,这样就有 $\sum n_i = 1$,这给计算带来很多方便. 特别在光学薄情况下,由于 $\beta \approx 1$,能级布居分布将与 n_{mol}无关. 但碰撞速率仍与系统的气体密度有关. 参考资料[23]中介绍了数值求解统计平衡方程的各种方法.

(3.3.28)式中的辐射场通常由以下几部分组成,即

$$I_{ij}=\frac{2h\nu^3}{c^2}\left(\frac{W}{\exp(h\nu_{ij}/kT_r)-1}+\frac{1}{\exp(h\nu_{ij}/kT_{BB})-1}+\frac{\eta_{ij}}{\exp(h\nu_{ij}/kT_d)-1}\right) \tag{3.3.30}$$

右方第一项表示外部源,如中心星、H Ⅱ 区、红外源或者邻近星的辐射场. T_r 为外部源等效辐射温度,W 为稀释因子. 第二项为微波背景辐射的贡献,式中 $T_{BB}\approx 2.7$ K. 第三项是尘埃辐射的贡献,T_d 为尘埃温度,η_{ij}为尘埃发射率. η_{ij}常用以下模型给出[24,25]:

$$\eta_{ij}(\nu_{ij})=\left(\frac{\nu_{ij}}{\nu_0}\right)\text{或}\left(\frac{\nu_{ij}}{\nu_0}\right)^2 \qquad \text{当 } \nu_{ij}<\nu_0$$
$$=1 \qquad \text{当 } \nu_{ij}>\nu_0 \tag{3.3.31}$$

关于 ν_0 的一种选择是:根据 350 μm 的观测,在 $T_d=100$ K 时,得到尘埃发射率为 0.1. 按照尘埃发射率与辐射波长大约 2 次方的反比关系,可导得在波长约为 110 μm 时,$\eta_{ij}\approx 1$.

方程(3.3.28)中的 β_{ij}由各个辐射跃迁中的光学厚度 τ_{ij}来确定. 在一维情况下,光学厚度取(3.3.16)式形式,即

$$\tau_{ij}=\left(n_j-n_i\frac{g_j}{g_i}\right)\frac{B_{ji}}{4\pi}hcv_{gr}^{-1}=\left(\frac{n_j g_i}{n_i g_j}-1\right)\frac{A_{ij}c^3 n_i n_{mol}}{8\pi\nu_{ij}^3 v_{gr}} \tag{3.3.32}$$

v_{gr}是分子云或分子包层中的速度场的梯度，v_{gr}和n_{mol}以及(3.3.30)式中的T_r和T_d均是计算中的模型参数.

解出所研究分子的一套能级布居数后，利用本章第一节给出的公式，我们可得到所求分子谱线的激发温度、发射强度以及谱线亮温等. 调整模型参数使其与观测相符便可得到所研究源的物理特性和运动学状态.

§3.4　天体物理环境下分子谱线轮廓的形成

3.4.1　谱线轮廓与谱线宽度

谱线形成包括谱线中心频率、频移、线强以及谱线轮廓和宽度等各个方面的问题. 如果说线心频率和频移提供了辐射源的化学组成和视向速度，不同分子的线强比提供了辐射源组成成分的丰度比，那么谱线的强度、宽度和谱型提供我们的信息则更丰富，如辐射源区的密度结构、运动学结构、温度以及光学厚度等.

谱线轮廓问题在本节之前已多次涉及到. 研究谱线轮廓就是要找到一个与频率有关的函数$\phi(\nu)$(在辐射粒子作随机或系统运动情况下也就是与速度有关的函数$\phi(v)$)来描写谱线的形状，并令$\phi(\nu)$满足归一化条件$\int\phi(\nu)\mathrm{d}\nu=1$. 这样，在谱线某一频率上的吸收系数

$$\kappa_\nu=\kappa_l\phi(\nu) \tag{3.4.1}$$

而κ_l就是κ_ν对整个谱线频率范围求积分，即$\kappa_l=\int\kappa_\nu\mathrm{d}\nu$. 对确定的谱线，$\kappa_l$为常数. 类似地对发射系数有

$$j_\nu=j_l\phi(\nu),\ j_l=\int j_\nu\mathrm{d}\nu$$

理想的原子和分子谱线，其谱线轮廓是尖锐的δ-函数. 实际的谱线因各种原因而加宽. 第一种引起谱线加宽的因素是量子力学中

的不确定关系，它是具有洛伦兹谱型的自然致宽. 这种致宽很小，在与天文分子有关的所有情况下，可以忽略谱线的自然致宽. 在分子天体物理中绝大多数谱线致宽是由分子运动的多普勒频移引起的. 如果辐射粒子相对观测者的视向速度为 v_z，则谱线频率由 ν_0 频移到 ν 时有

$$\nu=\nu_0\left(1+\frac{v_z}{c}\right) \tag{3.4.2}$$

单位体积中谱线频率位移到 $\nu\to\nu+d\nu$ 的粒子数为

$$dN(\nu)=N\phi(\nu)d\nu \tag{3.4.3}$$

$$\phi(\nu)=f(v_z)dv_z/d\nu=f(v_z)c/\nu_0 \tag{3.4.4}$$

因此谱线轮廓 $\phi(\nu)$的形式与辐射原子或分子所在处速度场分布 $f(v_z)$密切有关. 根据辐射粒子运动的性质可将速度场分成两大类：

(1)热速度场

指辐射粒子的运动服从麦克斯韦速度分布律，其相应的谱线轮廓是高斯型的，其谱线宽度可用多普勒线宽 $\Delta\nu_D$ 表征.

(2)非热速度场

非热速度场又可分成以下两类：

①局部的、随机的非热运动——湍动；

②系统运动——膨胀、塌缩、转动等.

随机的非热运动主要指分子云中的湍动. 根据湍动元的尺度 l 与光子自由程 L 的关系，又分微观湍动($l\ll L$)和宏观湍动($l\gg L$). 由于湍动的混乱与随机性质，特别是微观湍动，用高斯型轮廓来处理它是很好的近似. 在大尺度的系统运动情况下，大速度梯度模型则是最适宜的.

现在首先来讨论具有高斯谱型的谱线轮廓和谱线宽度的基本性质.

若辐射粒子的运动服从麦克斯韦速度分布，则其速度分布函数为

$$f(v_z)=(\pi^{-1/2}\Delta v)^{-1}\exp[-(v_z/\Delta v)^2] \qquad (3.4.5)$$

式中 $\Delta v=[\Delta v_D+\Delta v_{turb}]^{1/2}$；$\Delta v_D$ 是用多普勒速度宽度表示的局部热速度，Δv_{turb}是湍动速度宽度．由 $f(v_z)$导致的高斯型谱线轮廓，也称多普勒轮廓，相应的轮廓函数为

$$\phi(\nu)=(\pi^{1/2}\Delta\nu_D)^{-1}\exp[-(\nu-\nu_0)/\Delta\nu_D]^2 \qquad (3.4.6)$$

式中 $\Delta\nu_D$ 为多普勒谱线宽度：

$$\Delta\nu_D=\nu_0(\Delta v_D/c) \qquad (3.4.7)$$

$\Delta\nu_D$ 对应谱线翼上强度下降到峰值的 1/e 处时的谱线半宽度．这样，谱线的半极大全宽为

$$\Delta\nu_{FWHM}=2(\ln 2)^{1/2}\Delta\nu_D \qquad (3.4.8)$$

为了方便，同上节类似，取 x 为相对线心的无量纲频移，即 $x=\frac{\nu-\nu_0}{\Delta\nu_D}$，则 $\phi(x)$为无量纲的高斯型谱线轮廓函数，其形式如下：

$$\phi(x)=(\pi^{-1/2})\exp(-x^2) \qquad (3.4.9)$$

图 3.4 显示的是 $\phi(x)$的图形，它代表了热运动或微湍运动情

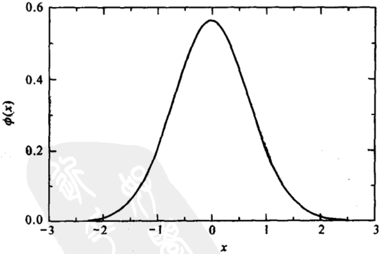


图 3.4　函数 $\phi(x)$的图形[3]

况下分子的无量纲的多普勒轮廓. 很明显,$\int\phi(x)\mathrm{d}x=1$. 引入$\phi(x)$后,吸收系数还可表示成

$$\kappa_\nu=\kappa\phi(x) \tag{3.4.10}$$

结合(3.4.1)式得

$$\kappa=\frac{1}{\Delta\nu_D}\int\kappa_\nu\mathrm{d}\nu=\kappa_1/\Delta\nu_D \tag{3.4.11}$$

所以κ是对多普勒轮廓平均的吸收系数. 而线心的吸收系数

$$\kappa_{\nu_0}=\kappa\phi(0)=(\pi)^{-1/2}\kappa \tag{3.4.12}$$

这样,相应线心处的光学厚度

$$\tau_{\nu_0}=(\pi)^{-1/2}\tau \tag{3.4.13}$$

如上一节所述,τ为对谱线平均(也即对多普勒轮廓平均)的光学厚度. 对于发射系数,类似地也有平均发射系数和线心发射系数之分. 在所有我们感兴趣的分子谱线情况下,可以近似认为发射和吸收的轮廓相同,因此得到源函数S_ν与频率无关,仅是谱线激发温度的函数.

在纯热运动情况下,由于$\Delta v_D=(2kT/m)^{1/2}$,将有关常数代入,可得用谱线半极大全宽表示的热速度宽度为

$$\Delta v_{FWHM}=2(\ln 2)^{1/2}\Delta v_D=0.2(T/A)^{1/2}\ \mathrm{km\cdot s^{-1}} \tag{3.4.14}$$

这里T是温度,单位为K;A是原子质量数. 在典型的分子云温度(约30 K)下,得此热速度宽度约0.2 km·s^{-1}. 而由CO分子观测得到的谱线宽度通常是几至十几km·s^{-1}. 因此热运动不能完全反映分子云中实际存在的运动. 大多数分子谱线均呈现出超声的线宽. 湍动和大尺度的系统运动是重要的原因.

下面具体分析在热运动和微观湍动情况下,最终的谱线宽度Δv_{FWHM}还与分子云的什么特性有关. 假定有一个具有高斯型谱线轮廓的均匀云,其固有的速度宽度为Δv_i(即指谱线光薄时的Δv_{FWHM}),这个Δv_i可以是热速度宽度,也可以是局部的微湍速度

宽度．此时谱线轮廓作为相对线心速度位移 v 的函数可以写成

$$I_v=I_0[1-\exp[-\tau(v)] \tag{3.4.15}$$

式中光学厚度 $\tau(v)=\tau_{\nu_0}\exp\left[-4\ln2\left(\frac{v}{\Delta v_i}\right)^2\right]$　(3.4.16)

随着谱线中心的光学厚度的增加($\tau_{\nu_0}>1$ 后)，满足(3.4.15)式的谱线轮廓将逐步从高斯型向平顶型过渡，并具有如下式表示的最终的线宽[26]：

$$\Delta v_{\rm FWHM}=\frac{\Delta v_i}{\sqrt{\ln2}}\left\{\ln\left[\frac{\tau_{\nu_0}}{\ln\left(\frac{2}{1+\exp(-\tau_{\nu_0})}\right)}\right]\right\} \tag{3.4.17}$$

由上式可见，热或微湍线宽将随线心光厚的对数关系缓慢增加．在 τ_{ν_0} 的两个极限情况下

$\tau_{\nu_0}\to0$ 时　　　　$\Delta v_{\rm FWHM}\to\Delta v_i$

$\tau_{\nu_0}\to\infty$时　　　　$\Delta v_{\rm FWHM}\to\Delta v_i\left(\frac{\ln\tau_{\nu_0}}{\ln2}\right)^{1/2}$

按(3.4.17)式，下面列出了部分数值结果：

τ_{ν_0}	≪1	1	3	10	12	60	100	1 000
$\frac{\Delta v_{\rm FWHM}}{\Delta v_i}$	1	1.2	1.5	1.96	2	2.5	2.7	3.24

这一结果在定性上与观测基本相符．在大多数情况下光厚的^{12}CO谱线，其线宽均大于光薄的^{13}CO 谱线．

近 10 多年来的分子谱线观测揭示的另一个重要事实是分子云的速度频谱表现出程度不同的波动性质，它表明分子云是高度团块性的．分子云在形成和演化过程中不断碎裂成大大小小的团块，这些团块间的速度差别大于每一个团块内部的局部运动，这就降低了上述的 $\Delta v_{\rm FWHM}$对谱线光厚的依赖性．这种分子云中不同团块间的复杂运动属于宏观湍动的性质．在存在这种大尺度运动的时候，单个高斯模型已不再适用．更可靠、更复杂的谱线轮廓模型将涉及到在一个合理的云模型下作详细的辐射转移处理．

分子谱线超宽的另一种重要的解释是分子云整体的一种系统的运动，如第一章提到过的膨胀、塌缩、转动以及分子外向流等. Sobolev 近似(即 LVG 模型)是处理具有单调变化速度场中谱线形成的最常见的方法. 下一节将通过讨论膨胀大气中分子谱线形成的具体过程详细介绍 Sobolev 近似的实质，处理系统运动情况下常用的等视向速度面方法以及速度场、光学厚度和天线波束等因素对分子谱线轮廓形成的影响.

3.4.2 膨胀大气中各种分子谱线轮廓的形成机制

本节内容适于研究作系统运动的分子云、拱星分子包层、气体星云以及尘云等情况下谱线的形成. 本节以膨胀大气为例，但所讨论的方法也适于作塌缩或转动运动时分子谱线轮廓的计算.

1. Sobolev 近似(LVG 模型)

我们知道，大多数情况下的膨胀大气可以用球形几何学来处理，并采用 p,z 坐标系统(见图 3.5). 此时按球形几何学，沿 z 方向，瞄准距离为 p 时观测到的流量为

$$F_\nu = \int I_\nu(p,\infty)2\pi p\mathrm{d}p/D^2 \tag{3.4.18}$$

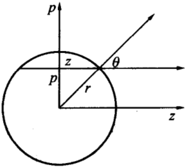


图 3.5 膨胀大气的球形几何学

式中 I_ν 为谱线强度，D 为辐射源离观测者的距离. 显然观测到的流量是 ν 的函数. 对谱线讲，则以谱线轮廓为表征. 对于热气体，由其局部的随机运动所导致的谱线致宽，即多普勒致宽决定. 谱线轮廓由(3.4.6)式表示. 谱线强度下降到 1/e 的峰值强度时所对应的谱线半宽即多普勒宽度 Δv_D，也可称为局部热速度，记作 v_{th}($=\sqrt{2kT/m}$).

"Sobolev 局域近似"认为：

除上述的随机运动外，若辐射源还存在一个系统的运动（如塌缩或膨胀），其速度为 v，则 Sobolev 局域近似可表为：当 $v \gg v_{th}$ 时，谱线中某一确定频率的辐射只在线度为 l 的一个小范围内发生（$l \approx \frac{2v_{th}}{\partial v_z/\partial z}$，$v_z$ 为 v 在视向上的投影），而在 l 外这一辐射不被其它分子所吸收，也不能再引起其它相同能级间的跃迁，即辐射在 l 之外将不变地直接逸出星云之外．Sobolev 还假定：在 l 内，κ_ν，j_ν 和 S_ν 均为常数（即局域近似），在 l 外，$\kappa_\nu=0$，$j_\nu=0$，$S_\nu=0$．要使局域 l 内，S_ν 为常数，只有 l 很小时才可成立，这样就引出了大速度场梯度的条件．（注：当随机运动是湍动时，条件中的 v_{th} 用湍动速度 v_{trub} 替代．）

"LVG（大速度场梯度）模型"

由于系统运动的存在，谱线中心的频率 ν_0，因多普勒效应位移至 ν'．如果系统径向运动速度 v 在视线方向投影为 v_z，则 $\nu'=\nu_0+v_z\nu_0/c$，按 Sobolev 局域近似只有在 $\nu'-\Delta\nu_D \rightarrow \nu'+\Delta\nu_D$ 频率范围内入射的光子能够与源中的分子发生相互作用，吸收或再发射．这样，在星云某处 (x,y,z) 于辐射有贡献的频率只在

$$\underset{(A)}{\nu_0+\frac{\nu_0}{c}v_z(x,y,z)}\underset{(B)}{-\Delta\nu_D}\rightarrow\underset{(A)}{\nu_0+\frac{\nu_0}{c}v_z(x,y,z)}\underset{(B)}{+\Delta\nu_D}$$

A（由系统运动引起），B（由热运动引起）

范围内变化．或者说，谱线中不同频率辐射对应星云中不同的速度 $v_z(x,y,z)$．如图 3.6 所示．也即只在 $v_z-\Delta v_z \rightarrow v_z+\Delta v_z$ 速度范围内的分子对频率 ν 的辐射有贡献．相应的尺度范围

$$z_2-z_1=\left|\frac{2v_{th}}{\partial v_z/\partial z}\right|=l \qquad (3.4.19)$$

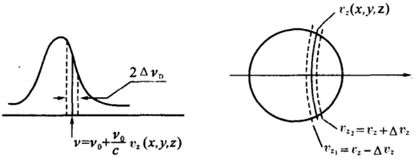


图 3.6　LVG 模型中谱线出射频率与星云速度场对应关系示意图

Sobolev 近似的思想在实际计算中有广泛的应用，如：当我们计算谱线轮廓中某个速度上辐射分子的柱密度或辐射强度时只要沿视线方向从 $z_2 \to z_1$ 或者从 $v_z - v_{th} \to v_z + v_{th}$ 对有关的函数进行积分就可以了，从而使计算大为简化[27]. 前面已经提到 Sobolev 近似要符合得好，l 必须很小，这就要求 $\frac{\partial v_z}{\partial z} \gg v_{th}$. 以球形云的膨胀或塌缩为例，如云的径向运动速度 $v(r)$ 为常数，要满足上述条件，就要求 $v(r) \gg v_{th}$，这完全是由云的球形几何学所决定的.

2. 等视向速度面(CVS)方法[28,29]

等视向速度面(CVS)方法可用来计算分子谱线的理论轮廓. 通过对观测轮廓的拟合，可研究分子辐射及其所在区的物理性质，了解影响分子谱线观测轮廓形成的各种天文因素.

在谱线某个频率处，发射系数 $j_\nu = j\phi(\nu)$，吸收系数 $\kappa_\nu = \kappa\phi(\nu)$，源函数 $S_\nu = j_\nu/\kappa_\nu = j/\kappa$(假定发射和吸收的轮廓函数 $\phi(\nu)$ 相同).

现在观测者在 $z=\infty$，投影距离为 p 处，则其观测到的频率为 ν 的分子辐射为

$$I(p,\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} j_\nu e^{-\int_z^{\infty}\kappa_\nu dz'} dz \qquad (3.4.20)$$

根据 LVG 模型，频率为 ν 的光子只来自包层的一小部分. 这部分

气体的视向速度为 v_z. 它和线心频率 ν_0，观测频率 ν 间满足关系：

$$\nu=\nu_0+\frac{\nu_0}{c}v\cdot\mu,\mu=\cos\theta$$

θ 为分子云或分子包层系统运动速度与视线方向夹角.

这样，ν,ν_0 已知，可找到 v_z，在一定的 $v(r)$（空间速度分布）规律下，这部分气体必然对应空间确定的位置，即所谓的等视向速度面(CVS). (CVS 是 Constant Velocity Surface 的缩写.)

选某个参考速度 $v_{\rm ref}$. 对于速度分布 $v=v_\infty\left(1-\frac{1}{r}\right)^{1/2}$，通常我们选 $v_{\rm ref}=v_\infty$（极限膨胀速度）. 对于速度分布 $v=ar$，通常选 $v_{\rm ref}=ar_1$，ar_1 是外向流基底速度.

定义：无量纲频率参量

$$x=\frac{\nu-\nu_0}{\nu_0}\frac{c}{v_{\rm ref}} \tag{3.4.21}$$

和无量纲速度分布

$$u=\frac{v(r)}{v_{\rm ref}} \tag{3.4.22}$$

则由 $\frac{\nu-\nu_0}{\nu_0}=\frac{v_z}{c}$ 得

$$x=\frac{v_z}{v_{\rm ref}}=\frac{v(r)\mu}{v_{\rm ref}}=u\mu \tag{3.4.23}$$

显然，相同的 x 分布确定一个等视向速度面. 由于原子或分子的辐射在一定 ν 附近，都有一个多普勒宽度 $\pm\Delta\nu_D$，它是由随机的热或湍动运动引起的. 因此，准确地说，频率 ν 的辐射来自一个围绕 CVS 附近的一个局部区域.

下面我们将举例分析在各种速度场分布下，等视向速度面的分析方法及其形状.

(1) $v(r)$ 为常数时（即气体作等速膨胀）

选 $v_{\rm ref}=v$，则 $u(r)=1$，$x=u(r)\mu=\mu$，且有 $-1\leqslant x\leqslant 1$.

这样观测到的每一个具有频率为 x 的光子一定来自 $x=\cos\theta$ 的圆锥面，即以 2θ 角为顶角的旋转圆锥面. 其 CVS 形状和分子辐射频谱，如图 3.7 所示. $x=0$ 时，$\theta=90°$；$x=1$ 时，$\theta=0$. 辐射强弱相对 x 的变化见图 3.8. (其证明见下文)

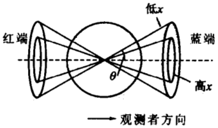


图 3.7 $v(r)$为常数时的 CVS 面

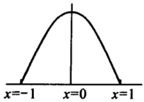


图 3.8 辐射强度随 x 的变化

(2)$v(r)=a\cdot r$ 时

选参考速度 $v_{\text{ref}}=a\cdot r_1$，则 $u(r)=\dfrac{r}{r_1}$，$x=u\mu=\dfrac{r}{r_1}\dfrac{z}{r}=\dfrac{z}{r_1}$，$r_1$ 为常数.

此时，等视向速度面，也即等 x 面应是平行 p 轴的 z 为常数的平面. 如图 3.9 所示.

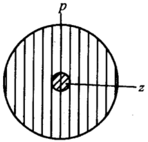


图 3.9 $v(r)=a\cdot r$ 时的 CVS 面

下面我们来讨论在一定速度分布下，分子谱线轮廓的详细计算. 由以上分析可知，频率为 ν 的发射区对应于等视向速度面 z_0. 附近的一个小范围内，即 $z_0-\Delta z\rightarrow z_0+\Delta z$. 令 $z_1=z_0-\Delta z$，$z_2=z_0+\Delta z$. z_1 面对应频率 ν_1，z_2 面对应频率 ν_2. 而

$$\nu_1=\nu-\Delta\nu_D=\nu_0-\nu_0 v_z(p,z_1)/c$$

$$\nu_2=\nu+\Delta\nu_D=\nu_0+\nu_0 v_z(p,z_2)/c$$

则
$$2\Delta\nu_D=\frac{\nu_0}{c}[v_z(p,z_2)-v_z(p,z_1)]$$
对于高的气体流速，z_2-z_1 将足够小，为此可用台劳级数展开：
$$2\Delta\nu_D=\frac{\nu_0}{c}\left(\frac{\partial v_z}{\partial z}\right)(z_2-z_1)$$
则
$$z_2-z_1=\frac{2\Delta\nu_D c}{\nu_0}\Big/\left(\frac{\partial v_z}{\partial z}\right)_{z_0}=\frac{c}{\nu_0\phi_0}\Big/\left(\frac{\partial v_z}{\partial z}\right)_{z_0}$$
这和 Sobolev 近似中，$l\approx\frac{2v_{th}}{\partial v_z/\partial z}$是一致的．此时
$$I_\nu(p,\infty)=\int_{z_1}^{z_2}j\phi_0 e^{-\int_z^{z_2}\kappa\phi_0 dz'}dz$$
根据 Sobolev 近似，κ，j 取 z_0 处的值，速度梯度越大，z_2-z_1 越薄，这种近似的可信度越高．这样
$$\begin{aligned}I_\nu(p,\infty)&=\int_{z_1}^{z_2}j_0\phi_0 e^{-\kappa_0\phi_0(z_2-z_1)}dz=j_0\phi_0 e^{-\kappa_0\phi_0 z_2}\frac{e^{\kappa_0\phi_0 z_2}-e^{\kappa_0\phi_0 z_1}}{\kappa_0\phi_0}\\&=S_0[1-e^{-\kappa_0\phi_0(z_2-z_1)}]=S_0[1-e^{\frac{-\kappa_0 c}{\nu_0}/\left(\frac{\partial v_z}{\partial z}\right)_{z_0}}]\end{aligned}\tag{3.4.24}$$

对于球形膨胀包层，$v=v(r)$，$v_z=v(r)\mu=v(r)\frac{z}{r}$，$r^2=p^2+z^2$，当 p 一定时，有
$$\frac{\partial r}{\partial z}=\frac{z}{r}=\mu$$
$$\begin{aligned}\frac{\partial v_z}{\partial z}&=\frac{v}{r}+z\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{v}{r}\right)=\frac{v}{r}+z\left(\frac{\partial r}{\partial z}\right)_p\frac{d}{dr}\left(\frac{v}{r}\right)=\frac{v}{r}+\\&\quad\frac{z^2}{r}\left(\frac{1}{r}\frac{dv}{dr}-\frac{v}{r^2}\right)=\frac{v}{r}\left[1+\left(\frac{v}{r}\frac{dv}{dr}-1\right)\mu^2\right]=\frac{v}{r}(1+\sigma\mu^2)\end{aligned}\tag{3.4.25}$$
式中
$$\sigma=\frac{r}{v}\frac{dv}{dr}-1=\frac{d\ln v}{d\ln r}-1\tag{3.4.26}$$

则　$I_\nu(p,\infty)=S_0\left[1-\exp\left(-\frac{\tau_0}{1+\sigma\mu^2}\right)\right]$　(3.4.27)

这里

$$\tau_0(r)=\frac{r}{v}\frac{c}{\nu_0}\kappa_0(r) \tag{3.4.28}$$

将流量　$F_\nu=\int_0^\infty I_\nu(p,\infty)2\pi p\mathrm{d}p/D^2$ 变换到对 r 的积分，因为 $p^2=r^2-z^2=r^2(1-\mu^2)$. 对一个已知频率 x, ($x=u(r)\mu$), $p^2=r^2[1-x^2/u(r)^2]$，于是有

$$2p\mathrm{d}p=2r\mathrm{d}r\left[1-\frac{x^2}{u^2(r)}\right]+2\frac{x^2r^2}{u^3(r)}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r}\mathrm{d}r$$

$$p\mathrm{d}p=r\mathrm{d}r\left[1+\left(\frac{\mathrm{d}\ln u}{\mathrm{d}\ln r}-1\right)\frac{x^2}{u^2}\right]=r\mathrm{d}r[1+\sigma\mu^2]\quad(x\text{ 为常数})$$

注意，x 一定时，CVS 一定，在此面上 r 的最小值 $r_{\min}$ 也一定. 最后得流量

$$F_\nu=\int_{r_{\min}(x)}^\infty S_0(r)\left(1-\mathrm{e}^{\frac{-\tau_0}{1+\sigma\mu^2}}\right)2\pi r\mathrm{d}r(1+\sigma\mu^2)/D^2$$

$$=2\pi\int_{r_{\min}(x)}^\infty S_0(r)\tau_0(r)\frac{1-\mathrm{e}^{\frac{-\tau_0}{1+\sigma\mu^2}}}{\frac{\tau_0}{1+\sigma\mu^2}}\quad r\mathrm{d}r/D^2 \tag{3.4.29}$$

$r_{\min}(x)$ 定义为 $\mu=1$ 时 CVS 面上的 r，其值大小由无量纲频率 x 决定. (4.3.29)式中的 $\sigma=\frac{r}{v}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r}-1$，它反映了速度场的分布对谱线的影响.

(3) $v(r)=a/r^n$ 时

取 $v_{\mathrm{ref}}=a/r_1^n$，其等视向速度面 CVS 由 $x=u(r)\mu=(r/r_1)^n\mu$ 给出，对于减速的物质外流，若 $n=1/2$，则 CVS 方程变为 $\frac{r}{r_1}=\frac{\mu^2}{x^2}$，它的 CVS 图见图 3.10. 此时 p 为常数的一条射线与 CVS 有两个

交点．而在速度 v 单调增加($v=ar$)或等速情况下，只有一个交点(见图 3.9 和 3.7)．此时每一个 x 上的强度只与射线上一个位置上的物理参数有关．现在有两个不同区域 x 相同，这就意味该两处都对应谱线轮廓上的同一个位置，即$\frac{\nu-\nu_0}{\nu_0}$一样．这样，该两处的辐射将发生耦合，对于求解问题是更复杂了．以图 3.10 为例，假设某视线方向与某等 CVS 面相交于点“2”和点“1”，那么通过该两点射线的分子谱出射强度为

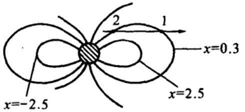


图 3.10　$v(r)=a/r^n$ 时的 CVS 图

$$I_\nu(p,\infty)=S_2(1-e^{-\tau_2})e^{-\tau_1}+S_1(1-e^{-\tau_1})$$

式中 S_1 和 τ_1 分别对应点“1”处局部区域的源函数和光学厚度，S_2 和 τ_2 则是对应点“2”的．最后谱线 ν 上的观测流量将由沿它的 CVS 面的积分得到．

3. 光学厚度对谱线轮廓的影响

下面讨论不同光厚下谱线的形成．假定包层≫恒星光球，就可令后者为一个点．现在就均匀速度场分布的例子进行具体分析．

已知观测到的流量可用方程(3.4.29)表示，当 v 为常数时，有

$$\sigma=\frac{d\ln v}{d\ln r}-1=-1$$

则　$$F_\nu=2\pi\int_{r_{\min}(\nu)}^{\infty}S_0(r)\tau_0(r)\frac{1-e^{\frac{-\tau_0}{1-\mu^2}}}{\frac{\tau_0}{1-\mu^2}}r\mathrm{d}r/D^2$$

现在 $u=1$，所以 $x=u\mu=\mu$，由图 3.7 可知 $r_{\min}(x)=0$，故上式还可

写成

$$F_\nu = 2\pi\int_0^\infty S_0(r)\tau_0(r)\,\frac{1-\mathrm{e}^{\frac{-\tau_0}{1-x^2}}}{\frac{\tau_0}{1-x^2}}r\mathrm{d}r/D^2 \tag{3.4.30}$$

下面讨论两种极端情况：

(1)$\tau_0 \gg 1$ 光厚时，则 $\mathrm{e}^{\frac{-\tau_0}{1-x^2}}=0$

$$F_\nu = (1-x^2)2\pi\int_0^\infty S_0(r)r\mathrm{d}r/D^2 \propto (1-x^2) \tag{3.4.31}$$

故 $x=0$ 时，F_ν 最大，$x=\pm 1$ 时，$F_\nu=0$. F_ν-x 曲线恰为抛物线(如图 3.8 所示). 这正是我们在很多光厚分子谱线中所见到的谱形.

(2)$\tau_0 \ll 1$ 光薄时，则 $1-\mathrm{e}^{\frac{-\tau_0}{1-x^2}} \approx \tau_0/(1-x^2)$

$$F_\nu = 2\pi\int_0^\infty S_0(r)\tau_0(r)r\mathrm{d}r/D^2 = \text{常数} \tag{3.4.32}$$

即谱形平坦. 在许多分子云和分子包层中，以上两种情况均可见到. 如^{12}CO 是光厚的，^{13}CO 是光薄的. 通常前者的轮廓是抛物线的，后者是平顶轮廓.

4. 天线波束对谱线轮廓的影响

在已观测到的天文分子谱线中大约 90%处于射电波段(见本书表 1.2)，因此有必要对上一节计算出的谱线轮廓作射电望远镜功率方向图(或称天线波束)的改正. 当所观测的源相对波束讲不是点源，而是部分可分辨时，这一改正更是必不可少的. 假设 G 为天线波束方向图，则观测流量

$$F_\nu = 2\pi\int_0^\infty I_\nu(p,\infty)G(p)p\mathrm{d}p/D^2 \tag{3.4.33}$$

常见天线功率方向图是高斯形的，即

$$G(p)=\left(\frac{4\ln 2}{\pi B^2}\right)e^{-\frac{(4\ln 2)p^2}{B^2}} \tag{3.4.34}$$

上式中 B 为天线波束宽度. 同样,为求 F_ν 需要将 $G(p)$ 化成 r 的函数. 利用 $p^2=r^2[1-x^2/u^2]$,可得

$$G(p)=\left(\frac{4\ln 2}{\pi B^2}\right)e^{-\frac{(4\ln 2)}{B^2}\left(1-\frac{x^2}{u^2}\right)r^2}$$

$$F_\nu=\left(\frac{8\ln 2}{B^2D^2}\right)\int_{r_{\min}(x)}^{\infty}S_0(r)\tau_0(r)\cdot \frac{1-e^{-\frac{\tau_0}{1+\sigma\mu^2}}}{\frac{\tau_0}{1+\sigma\mu^2}}e^{-\frac{(4\ln 2)}{B^2}\left(1-\frac{x^2}{u^2}\right)r^2}r\mathrm{d}r \tag{3.4.35}$$

在同时考虑天线波束效应下,首先来分析速度场为常数时的谱线轮廓,并分两种情况进行讨论:

(1)$\tau\gg1$ 时(如^{12}CO 情况),结合(3.4.31)式,有

$$F_\nu=\left(\frac{8\ln 2}{B^2D^2}\right)\int_0^{\infty}S_0(r)(1-x^2)e^{-\frac{(4\ln 2)}{B^2}(1-x^2)r^2}r\mathrm{d}r$$

$$=(1-x^2)\cdot(x\text{ 的函数}) \tag{3.4.36}$$

谱线轮廓由图 3.11 所示.

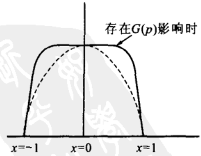


图 3.11　考虑天线波束效应时的谱线轮廓(当 $\tau\gg1$)

定性解释：当天线对准源中心时，波束方向图对中心部分（即 x 值大，p 值小处）接收能力最强，而在源的外圈部分（x 小，p 大处）反之. 因此考虑天线波束效应后，增强了线翼的辐射，使原来的抛物线轮廓两侧抬高，形成在光厚分子谱线中常见的平台(plateau)形状. 若天线波束是无限大时，源是不可分辨的，这时谱线轮廓又恢复到原来的抛物线轮廓. (3.4.35)式中指数因子趋于1，即不用考虑 $G(p)$ 对谱线轮廓的影响.

方程(3.4.32)和(3.4.36)中的源函数，也可表示成激发温度的函数，即 $S=B_\nu(T_{ex})$，则观测流量也可用天线温度 T_A 来表示，即

$$T_A(x)=\left(\frac{8\ln 2}{B^2D^2}\right)\int_0^\infty T_{ex}(r)(1-x^2)e^{-\frac{(4\ln 2)}{B^2}(1-x^2)r^2}r\mathrm{d}r \tag{3.4.37}$$

(2)$\tau \ll 1$ 时（如^{13}CO 情况）

$$F_\nu=\left(\frac{8\ln 2}{B^2D^2}\right)\int_{r_{min}(x)}^\infty S_0(r)\tau_0(r)e^{-\frac{(4\ln 2)}{B^2}(1-x^2)r^2}r\mathrm{d}r$$

假定源函数 $S_0(r)$ 为常数，$\kappa_0=n(r)\alpha_\nu(r)$，则 $\tau_0=n(r)\alpha(r)(r/v)\cdot(c/\nu_0)$，$\alpha_\nu(r)$ 是在 r 处每个分子的吸收系数. 当速度场分布为常数，分子数密度 $n(r)$ 一定按 r^{-2} 分布，即 $n(r)=K/r^2$，其中 K 为常数.

令包层延伸到半径为 R 之外，则

$$F_\nu=\left(\frac{8\ln 2}{B^2D^2}\right)S_0\frac{c}{v\nu_0}\int_0^\infty \kappa_0(r)e^{-\frac{(4\ln 2)}{B^2}(1-x^2)r^2}r^2\mathrm{d}r$$

将 $n(r)=K/r^2$ 代入，并假定 α_ν 与 r 无关，得

$$F_\nu=\left(\frac{8\ln 2}{B^2D^2}\right)S_0\frac{c}{v\nu_0}K\alpha_\nu\int_0^R e^{-\frac{(4\ln 2)}{B^2}(1-x^2)r^2}\mathrm{d}r$$

令　$t=\left[\frac{(4\ln 2)}{B^2}(1-x^2)\right]^{1/2}r$，则有

$$\mathrm{d}r=\left[\frac{(4\ln 2)}{B^2}(1-x^2)\right]^{-1/2}\mathrm{d}t$$

$$F_\nu=\left(\frac{8\ln 2}{B^2D^2}\right)S_0\frac{c}{v\nu_0}K\alpha_\nu\cdot$$

$$\frac{B}{2(\ln 2)^{1/2}}\frac{1}{(1-x^2)^{1/2}}\int_0^{\frac{2(\ln 2)^{1/2}}{B}(1-x^2)^{1/2}R}\mathrm{e}^{-t^2}\mathrm{d}t=$$

$$\frac{8\ln 2}{B^2D^2}S_0\frac{c}{v\nu_0}K\alpha_\nu R\cdot H\left[\frac{2(\ln 2)^{1/2}}{B}(1-x^2)^{1/2}R\right]\quad(3.4.38)$$

这里
$$H(y)=\frac{1}{y}\int_0^y\mathrm{e}^{-t^2}\mathrm{d}t$$

$$y=\frac{2(\ln 2)^{1/2}}{B}(1-x^2)^{1/2}R$$

已知
$$\int_0^y\mathrm{e}^{-t^2}\mathrm{d}t=y-\frac{1}{1!}\frac{y^3}{3}+\frac{1}{2!}\frac{y^5}{5}-\cdots$$

(3.4.38)式即为气体作等速膨胀时，在考虑天线波束时，在光薄情况下观测流量的严格表达式．定性看，在 v 为常数，不考虑天线方向图时，F_ν-x 是平顶形状．在考虑方向图，且是部分可分辨时（即 $B\sim R$，二者尺度相当），对频谱的中心部分，$x=0$，根据 CVS 图，应对应分子云或拱星分子包层的外圈部分，此时 p 大，$G(p)$ 小，所以原来的平顶状谱线轮廓中心处强度要减小．对频谱两侧，$x=\pm 1$ 的大值来讲，正好对应分子云或拱星分子包层的中心部分，此时 p 小，$G(p)$ 大，因此这部分分子的谱线辐射明显增强，最后我们得到双峰形的谱线轮廓．这种谱型在实测的光薄分子谱线中可经常见到．作为一个例子，图 3.12 给出了 ^{12}CO $J=1-0(\tau\gg 1)$ 和 ^{13}CO $J=1-0(\tau\ll 1)$ 常见的谱线轮廓，它完全符合上述的理论计算结果．

为了更清楚地比较谱线光深和天线波束对分子谱线轮廓的影

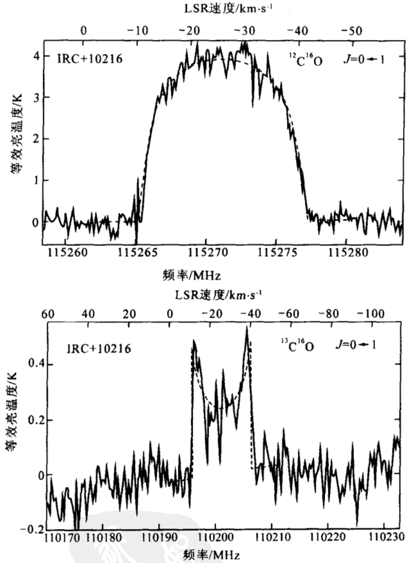


图 3.12　^{12}CO $J=1-0(\tau\gg1)$和^{13}CO $J=1-0(\tau\ll1)$的实测谱线轮廓和模型拟合[30]

响，图 3.13 小结了在等速运动情况下，谱线轮廓和谱线光厚以及源相对天线波束不同角大小的关系．图中(Φ_E 代表分子辐射源的

大小，Φ_B 代表天线波束的大小，(a)为平顶轮廓，(b)双峰轮廓，(c)抛物线轮廓，(d)圆顶轮廓.

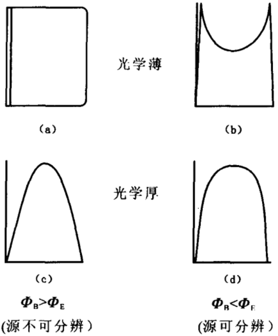


图 3.13　在不同谱线光厚和源相对天线波束 Φ_B、不同角大小 Φ_E 时的谱线轮廓

下面再分析一下，当速度场不为常数时的分子谱线轮廓.

若 $v(r)=ar$，a 为常数. 选 $v_{\mathrm{ref}}=aR$，则 $u=\frac{v(r)}{v_{\mathrm{ref}}}=\frac{r}{R}$，$x=u\mu\frac{r}{R}\frac{z}{r}=\frac{z}{R}$. 正如前述，CVS 面为平行 p 轴的直线族. 此时，

$$\sigma=\frac{\mathrm{d}\ln v}{\mathrm{d}\ln r}-1=\frac{r}{v}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r}-1=0$$

$$G(p)=\frac{\gamma}{\pi}\mathrm{e}^{-\gamma p^2},\gamma=\frac{4\ln 2}{B^2},p^2=r^2-z^2=r^2-x^2R^2$$

$$F_\nu=D^{-2}\int_{r_{\min}(\nu)}^{\infty}S_0(r)\tau_0(r)\,\frac{1-\mathrm{e}^{-\tau_0(r)}}{\tau_0(r)}G(x,r)2\pi r\mathrm{d}r \qquad (3.4.39)$$

(1) $\tau_0\gg1$ 时

在源不可分辨时，即天线波束 $B \gg R$，源为点源时，有

$$F_\nu = 2\pi D^{-2} \int_{r_{\min}(\nu)}^{\infty} S_0(r) r \mathrm{d}r = \pi D^{-2} \overline{S}_0 (R^2 - r_{\min}^2)$$

$$= \pi D^{-2} \overline{S}_0 R^2 (1 - x^2) \tag{3.4.40}$$

此时，仍为抛物线轮廓.

(2)$\tau_0 \ll 1$ 时

在分子云或分子包层中的气体作定常运动情况下，其中心天体质量损失率 $\dot{m}$ 应为常量. 在球形几何下，有 $\dot{m} = 4\pi r^2 n(r) \overline{\mu} m_{\mathrm{H}} v(r)$. 式中 n 是分子云或分子包层中的气体数密度，$\overline{\mu}$ 是气体的平均原子量，m_{H} 是氢原子质量. 当 $v = ar$ 时，可得粒子数密度分布 $n(r) = K/r^3$，K 是比例常数. 此时观测流量

$$F_\nu = D^{-2} \int_{r_{\min}(\nu)}^{\infty} S_0(r) \tau_0(r) G(x, r) 2\pi r \mathrm{d}r \tag{3.4.41}$$

式中 $G(x,r)$ 即天线波束方向图 $G(p)$. 由于 $\tau_0 = \kappa_0 \dfrac{r}{v(r)} \dfrac{c}{\nu_0}$，$\kappa_0 = n(r)\alpha_\nu$，则

$$\tau_0 = \kappa_0 \frac{r}{v(r)} \frac{c}{\nu_0} n(r) \alpha_\nu = \frac{A}{r^3}$$

A 也为常数. 最后得

$$F_\nu = 2\pi D^{-2} A \overline{S}_0 \int_{r_{\min}(\nu)}^{R} G(x, r) \frac{\mathrm{d}r}{r^2} \tag{3.4.42}$$

①天线不可分辨的情况

$G(x,r) = 1$(对点源讲)，同时考虑到在 $v(r) = ar$ 时，$x = \dfrac{z}{R} = \dfrac{r_{min}}{R}$

$$F_\nu = 2\pi D^{-2} A \overline{S}_0 \int_{r_{\min}(\nu)}^{R} \frac{\mathrm{d}r}{r^2} = 2\pi D^{-2} A \frac{\overline{S}_0}{R} \left(\frac{1}{x} - 1 \right) \tag{3.4.43}$$

可见，在 $x=0$ 时，$F_\nu\to\infty$；在 $x=+1$时，$F_\nu=0$. 当 x 为负值时，z 也为负值. 由于 $r_{\min}(x)$定义为 $\mu=1$ 时 CVS 面上的 r，所以此时 $r_{\min}=\left|\frac{z}{R}\right|=|x|$. 故 $x=-1$ 时，F_ν 也为0. 这样在 $v=ar$ 速度分布时，在光薄情况下，谱线轮廓如图 3.14 所示. 它与 $v=$常数时，$\tau_0\ll1$ 情况下的双峰谱轮廓，形态完全不同.

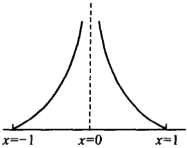


图 3.14　在 $v=ar$ 时，在光薄情况下的谱线轮廓

②天线可分辨的情况

已知，天线功率方向图

$$G(x,r)=G(p)=\frac{\gamma}{\pi}e^{-\gamma p^2}=\frac{\gamma}{\pi}e^{-\gamma(r^2-x^2R^2)},\gamma=\frac{4\ln2}{B^2}$$

由(3.4.42)式可得(在 $\tau_0\ll1$ 时)

$$F_\nu=2D^{-2}A\bar{S}_0\gamma^{3/2}\Phi[(\gamma R^2)^{1/2}x] \tag{3.4.44}$$

$$\Phi(ax)=e^{a^2x^2}\int_{ax}^{a}e^{-y^2}\frac{dy}{y^2},(y=\gamma^{1/2}r,a^2=\gamma R^2)$$

综上分析可知，在膨胀大气中观测到的分子谱线轮廓，不仅与谱线发射本身的源函数有关，还与射电天线的分辨率、功率方向图、分子云或拱星分子包层的速度场以及谱线光深情况有关.

在实际观测到的分子谱线中，有不少具有更为复杂的频谱形态. 如各种红、蓝不对称的谱型；反 P Cygni 谱型*；低强度的谱线宽翼发射以及比热宽度还窄的超强谱线等. 上面介绍的系统运动下谱线形成的理论仍然是解释各种频谱形态的基础. 但是存在背

* P Cygni 谱型指的是光谱中发射线的短波段(蓝端)有一条吸收线. 这种谱型通常在具有向外膨胀的气壳的恒星中被观测到，典型的即天鹅座 P 型星(P Cygni stars). 反 P Cygni 谱型正好相反，它是在发射线的长波段(红端)有一条吸收线.

景源时，在上述计算谱线流量或天线温度的方程中，必须用 $S_\nu - I_{bg}$ 替代 S_ν 或用 $T_{ex} - T_{bg}$ 替代 T_{ex}. 这样，当一个冷的、大的分子包层内含有一个热区域时，观测到的谱线轮廓中谱线红翼会系统地强于蓝翼，自吸收谱征则可在线心附近找到. 如果该分子包层或分子云处于气体下落(塌缩)的状态，则观测到的谱型恰好相反，即蓝翼强于红翼，甚至出现反的 P Cygni 的谱型(如分子云内部存在 HⅡ 区时). 当分子云中出现激波或高速的分子外向流时，我们会观测到远大于声速的超宽谱线或者低强度上的高速线翼. 当分子辐射是脉泽时，则由于非线性放大观测到的谱线既窄又强(详见本书第四章). 此外，不少天文分子谱的谱特征数很多，它们多半起因于分子云或者拱星分子包层中不均匀分布气体团块的复杂运动. 当然，最后的确认需要进行不同速度通道上分子谱的成图测量. 在银道面附近由于视线方向密集的分子云星际发射的污染，使观测到分子谱呈现出复杂的多峰形态，以致无法确定我们所要的信息. 另一类观测到的特殊谱型是由频率相近的不同种类分子谱线或精细结构谱线间的混合所引起，在第四章脉泽抽运的谱线重叠机制中再次会涉及到它们. 分子云的转动现象已被大量的观测事实所证认. 当分子云中出现转动时，可以在较大尺度的分子谱线成图观测中发现沿某个方向速度梯度的存在或者发现不同速度上分子谱线的天图在空间是有规律地错开的. 总之，观测到的变化多端的分子频谱形态提供了我们丰富的分子云和分子包层结构、运动学乃至成协天体演化的信息. 我们将在本书下册中详细讨论它们.

3.4.3 天文分子谱线形成的微观湍动方法

Falgarone 和 Phillips 曾经指出，根据分子云的观测和理论分析有相当的证据可以说明，分子云中的气体流应该是湍动的. 而且这种湍动直接影响到观测的谱线轮廓、线宽和云结构[31]. 在湍动情况下如何计算谱线的出射轮廓，如何导出湍动分子云的基本物

理参数呢？最早而且较严格地处理了湍动介质中分子谱线的激发和辐射转移问题的是 Leung 和 Liszt 的工作[32]. 他们在稳定的、球形的和湍动速度场的模型下，数值求解了 CO 的 10 个最低能级的辐射转移和统计平衡方程. 这一方法作为分子谱线非热动平衡的一种标准模型沿用至今. 因此我们在这一节将重点介绍 Leung 和 Liszt 的微观湍动模型. 最后对微湍模型和系统模型的结果进行比较.

在辐射转移理论中，湍动运动分微观湍动和宏观湍动两大类. 在微观湍动中，湍动元的特征尺度，或者说速度场的相关长度 l 远小于光子的平均自由程 L. 反之，若 $l \gg L$ 则为宏观湍动. 这些无规的湍动将造成分子谱线的很大线宽. Leung 和 Liszt 利用球状的微湍分子云模型计算了 CO, CS 等双原子分子的谱线轮廓，得到了与观测比较相符的结果[32,33]. 现在我们就来介绍这一模型的基本思想和在这一非热模型下确定分子云物理参数的具体方法[32,34,35].

假设一个球状的分子云，云中的每一点是通过辐射场与其它所有点发生联系的. 那么沿 z 视线方向，分子谱线的出射强度为

$$I_\nu = \int_0^\infty \frac{n_u A h\nu \varepsilon(\nu)}{4\pi} \exp\left\{-\int_0^z \left[n_l B_{lu}\phi(\nu) - n_u B_{ul}\varepsilon(\nu)\right] \frac{h\nu}{4\pi} dz\right\} dz \tag{3.4.45}$$

如果分子谱线的发射轮廓 $\varepsilon(\nu)$ 和吸收轮廓 $\phi(\nu)$ 一样，则 $\varepsilon(\nu) = \phi(\nu)$，通常

$$\phi(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta\nu} e^{-\left(\frac{\nu-\nu_0}{\Delta\nu}\right)^2} \tag{3.4.46}$$

其中 ν_0 是线心频率，$\Delta\nu$ 是局部谱线的宽度，它和速度频谱的宽度 Δv 的关系满足下式：

$$\Delta\nu = \frac{\nu_0}{c} \Delta v$$

Leung 和 Liszt 假设湍动速度以和热速度同样的方式进入计算，因此

$$\Delta v=(\Delta v_{D}^{2}+\Delta^{2}v_{T})^{1/2} \quad (3.4.47)$$

Δv_D 和 Δv_T 分别表示局部的热速度宽度和湍动速度宽度．如果分子云同时还具有一个速度分量为 v_z 的系统运动，则

$$\phi(\nu-\nu_0)=\frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta\nu}\mathrm{e}^{-\left(\frac{\nu-\nu_0\left(1+\frac{v_z}{c}\right)}{\Delta\nu}\right)^2} \quad (3.4.48)$$

对于纯湍动我们用方程(3.4.46)代入(3.4.45)式来计算谱线的轮廓．Δv_D，Δv_T 的选择标准是让 Δv 等于观测到的谱线宽度．这里需要说明的是将微观湍动处理成热的多普勒宽度是一种近似．近年来湍动的研究表明其速度分布在某些程度上看是非高斯型的．

现在我们讨论微湍情况下辐射转移方程的求解技术．这一技术和 Leung 在处理致密星际尘埃云时一样，采用的是数值求解的准扩散方法[34]．这一方法的基本思想是通过引进两个辅助函数，即各向异性因子 $f_\nu(r)$（它描述了辐射场的各向不均匀性）和位形函数 $\zeta_\nu(r)$（它依赖于问题的几何学），把辐射转移问题作为两点边界值问题来解．在计算开始时假设辐射场是各向同性的（扩散近似），也就是 $f_\nu=1/3$，$\zeta_\nu=1$，然后联立求解非线性的辐射转移的矩方程（上面提到的(3.4.45)式）和能级布居数的统计平衡方程，接着用射线跟踪方法解辐射场的角分布，修正 f_ν 和 ζ_ν，再逐级迭代……这个过程连续进行直到达到所要求的迭代精度．计算表明，这种迭代是稳定的和迅速收敛的．此种方法适用于球形和盘形分布的分子云，本节只讨论球形分布的情形．

球坐标下，在不考虑尘埃辐射和吸收的情况下，辐射转移方程具有如下形式：

$$\mu\frac{\partial I_\nu(r,\mu)}{\partial r}+\frac{1-\mu^2}{r}\frac{\partial I_\nu(r,\mu)}{\partial\mu}=-\kappa_\nu(r)I_\nu(r,\mu)+j_\nu(r) \quad (3.4.49)$$

这里 $\kappa_\nu(r)$ 和 $j_\nu(r)$ 是气体分子对辐射的吸收和发射系数；$\mu=\cos\theta$，θ 是径向和视向的夹角. 此时辐射强度不仅与 r 有关还与 θ 有关. 当 κ_ν 和 j_ν 是各向同性时，κ_ν 和 j_ν 只与 r 有关.

定义：辐射场的 $I_\nu(r,\mu)$ 的 n 次矩为 $M^{(n)}(r)$，则

$$M_\nu^{(n)}=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}I_\nu(r,\mu)\mu^n\mathrm{d}\mu$$

显然

$$J_\nu\equiv M_\nu^{(0)}=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}I_\nu(r,\mu)\mathrm{d}\mu$$

$$H_\nu\equiv M_\nu^{(1)}=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}I_\nu(r,\mu)\mu\mathrm{d}\mu=\frac{1}{4}F_\nu \tag{3.4.50}$$

$$K_\nu\equiv M_\nu^{(2)}=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}I_\nu(r,\mu)\mu^2\mathrm{d}\mu$$

上式中 J_ν 是平均辐射强度，F_ν 是辐射流量. 对方程(3.4.49)两边取 $\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\cdots\mathrm{d}\mu$ 积分，考虑到 κ_ν，j_ν 与 μ 无关，得

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial[r^2H_\nu(r)]}{\partial r}=-\kappa_\nu(r)J_\nu(r)+j_\nu(r) \tag{3.4.51}$$

对方程(3.4.49)两边再取 $\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\cdots\mu\mathrm{d}\mu$ 积分，得

$$\frac{\partial K_\nu(r)}{\partial r}+\frac{3\kappa_\nu(r)-J_\nu(r)}{r}=-\kappa_\nu(r)H_\nu(r) \tag{3.4.52}$$

这样，通过上述步骤，原来是两个变量的辐射转移方程变成只对一个变量求导的常微分方程. 为解(3.4.51)式和(3.4.52)式我们引入两个无量纲变量，即 f_ν 和 ζ_ν，以图找出由(3.4.50)式表示的几个矩量间的关系，进一步简化矩方程(3.4.51)和(3.4.52). 现定义各向异性因子 $f_\nu(r)$ 和位形函数 $\zeta_\nu(r)$ 如下：

$$f_\nu(r) \equiv K_\nu(r)/J_\nu(r)$$

$$\zeta_\nu(r) \equiv \exp\left\{\int_0^r \left[3 - \frac{1}{f_\nu(x)}\right]\frac{\mathrm{d}x}{x}\right\} \tag{3.4.53}$$

将(3.4.53)式代入(3.4.52)式得

$$\frac{\partial}{\partial r}(f_\nu \zeta_\nu J_\nu) = -\kappa_\nu \zeta_\nu H_\nu \tag{3.4.54}$$

再将上式代入方程(3.4.51)，消去 H_ν，得

$$\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{r^2}{\kappa_\nu \zeta_\nu}\frac{\partial}{\partial r}(f_\nu \zeta_\nu J_\nu)\right] = r^2(\kappa_\nu J_\nu - j_\nu) \tag{3.4.55}$$

(3.4.55)式即非线性的辐射转移矩方程，它只是 J_ν 的方程．可以和统计平衡方程联立求解．方程中 $f_\nu(r)$和 $\zeta_\nu(r)$若不用 Eddington 近似的值(Eddington 近似时，$f_\nu=1/3, \zeta_\nu=1$)，则必须由 $I_\nu(r,\mu)$ 来求得它们(通过(3.4.53)式和(3.4.50)式)．在这里我们采用射线跟踪的方法，如图 3.15 所示．

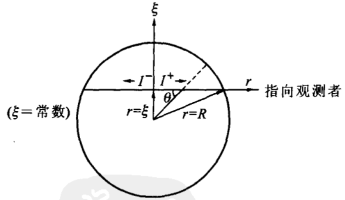


图 3.15 变量 $r, \mu(=\cos\theta), \xi$ 和 I^+, I^- 的几何意义

首先用坐标(r,ξ)代替(r,μ)，有：

$$\xi = r\sin\theta = r(1-\mu^2)^{1/2}$$

$$\mu = \cos\theta = \pm[1-(\xi/r)^2]^{1/2} \tag{3.4.56}$$

由于 μ 有＋，－两种值，可以将 I_ν 按 μ 的＋，－分开．即：$I_\nu^+(1 \geqslant \mu$

$\geqslant 0$)和 I_ν^- ($0>\mu\geqslant -1$). 沿 ξ=常数传播的 I^+ 和 I^- 分别代表沿视线正向和反向传播的辐射. 此时,方程(3.4.49)可写成

$$\mu\frac{\partial I^+}{\partial r}=-\kappa_\nu I_\nu^+ + j_\nu \qquad (3.4.57)$$

$$\mu\frac{\partial I^-}{\partial r}=-\kappa_\nu I_\nu^- + j_\nu \qquad (3.4.58)$$

定义:

$$\begin{aligned} U_\nu &\equiv \frac{1}{2}(I_\nu^+ + I_\nu^-) \\ V_\nu &\equiv \frac{1}{2}(I_\nu^+ - I_\nu^-) \end{aligned} \qquad (3.4.59)$$

再用 U_ν,V_ν 表示前面定义的几个矩量,得:

$$\begin{aligned} J_\nu &= \int_0^1 U_\nu(r,\mu)\mathrm{d}\mu \\ H_\nu &= \int_0^1 V_\nu(r,\mu)\mu\mathrm{d}\mu \\ K_\nu &= \int_0^1 U_\nu(r,\mu)\mu^2\mathrm{d}\mu \end{aligned} \qquad (3.4.60)$$

将(3.4.57)式和(3.4.58)式依次相加和相减,得:

$$\mu\frac{\partial U_\nu}{\partial r}=-\kappa_\nu V_\nu \qquad (3.4.61)$$

$$\mu\frac{\partial V_\nu}{\partial r}=-\kappa_\nu U_\nu + j_\nu \qquad (3.4.62)$$

在上两式中消去 V_ν,最后得

$$\mu\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\mu}{\kappa_\nu}\frac{\partial U_\nu}{\partial r}\right)=\kappa_\nu U_\nu - j_\nu \qquad (3.4.63)$$

(3.4.63)式即线性射线方程. 此时,只要知道 κ_ν,j_ν(它们是分子能级布居数的函数,能级布居数可通过解统计平衡方程求得),就可由方程(3.4.63)解得 U_ν,再由 U_ν 按方程(3.4.60)计算出 J_ν,K_ν,

接着可修正 f_ν 和 ζ_ν.

在非热平衡和非系统运动情况下，辐射转移和统计平衡联立求解的基本步骤可归纳如下[32,35]：

(1)第一步给出 $r=r_c$ 时的 J_ν 和 J'_ν 值，即 $J_\nu(r_c)$和 $J'_\nu(r_c)$；

(2)用 $J_\nu(r_c)$值代入统计平衡方程求出一套分子能级的布居数 $n(r_c)_{\min},\cdots,n_i(r_c),\cdots,n_j(r_c),\cdots,n(r_c)_{\max}$来；

(3)有了布居数后，可以求得 r_c 处的吸收系数和发射系数 $\kappa_\nu(r_c)$和 $j_\nu(r_c)$；

(4)由射线方程(3.4.63)解出 U_ν，再由 U_ν 作积分得 J_ν 和 K_ν，由 J_ν 和 K_ν 得 f_ν 和 ζ_ν；

(5)解方程(3.4.55). 首先将其变成差分的形式，然后解 $J_\nu(r)$. 若取步长为 h，$r_1=r_c+h$，则我们可得到 $J_\nu(r_1)$和 $J'_\nu(r_1)$. 接着再回到步骤(1)，如此继续下去，可逐点算到分子云的外边界 R 处的 $J_\nu(R)$和 $J'_\nu(R)$. 若所给的边界条件是 $J_\nu(r_c)$和 $J_\nu(R)$，则开始令 $\left.\frac{\mathrm{d}J_\nu}{\mathrm{d}r}\right|_{r_c}=a$($a$ 是常数)，代入计算，最后由 $J_\nu(r)_{r=R}=J_\nu(R)$定出 a. 谱线的出射强度可由下式求得

$$I_\nu^+(R,\mu)=2U_\nu(R,\mu)-I_\nu^-(R,\mu) \tag{3.4.64}$$

如果假设分子云是嵌埋在 2.7 K 的微波背景中，则 $I_\nu(R)=B_\nu(T=2.7\ \mathrm{K})$. 为了与观测比较，我们定义出射的天线温度

$$T_\mathrm{A}(\nu,\mu)=\frac{c^2}{2\kappa\nu^2}[I_\nu^+(R,\mu)-B_\nu(T=2.7\ \mathrm{K})] \tag{3.4.65}$$

这里假设 $T_\mathrm{A}(\nu,\mu)$是由大气外理想设备观测到的天线温度.

在微湍模型数值求解中，所用谱线轮廓由(3.4.46)式表示. 上述每一个从 $r=r_c$ 到 $r=R$ 的计算过程，是对谱线轮廓内一个确定的频率做的. 逐次改变 ν 就可求得整个谱线的理论轮廓.

至此我们介绍了两种模型方法，它们各有利弊，究竟哪一种模型可取，取决于分子云的真实情况. 微湍模型计算量大，且比 LVG

模型多要求一个参量. 在不考虑外辐射场时,LVG 方法的模型参量:T_k,$n(x)$,$n(H_2)$,dv/dr 等. 微湍模型参量:T_k,v_{turb},$n(x)$,$n(H_2)$,L(分子云尺度). 但微湍模型可得到谱线的自吸收轮廓. 有些谱线,其强度虽不相同,如同一分子的同位素谱线,但其辐射轮廓相似,则用 LVG 模型容易解释.

总之,对于真实分子云来说,纯系统运动和纯湍动模型只是两种极端情况. 分子云同时存在系统运动和无规运动可能更真实. 或者某部分前者为主,某部分后者为主. 如参考资料[36]对 M17 SW 的^{12}CO,^{13}CO 和 CS 等分子谱的计算表明,在模型中分子云中心部分以湍动为主,较外部分以塌缩为主. 所得谱线轮廓与实测结果最接近. 1992 年 Zhou 又基于微观湍动辐射转移程序建立了更普遍的分子云自里向外塌缩的分子谱线轮廓特征[37]. 当用其拟合 B335 塌缩核的 CS 和 H_2CO 分子谱线轮廓时,发现纯湍动模型会低估下落区的辐射强度,而 LVG 模型又会低估稳定包层的发射. Zhou 对下落区较内部分采用 LVG 模型,对稳定包层用微湍模型,取得了较好效果[38]. 这些事例说明,在选择计算分子谱线轮廓模型时,必须对具体的分子云作具体的分析和处理. 图 3.16(见下页)直观地展示了一个正在自里向外塌缩的分子红-蓝不对称的谱线轮廓特征,并给出了谱线中各部分特征所对应的分子云部位[39]. 这种谱型已在近年来分子云下落运动的搜寻中多次被观测到(参见 1.2 节).

最后要提到的是,当 $l \ll L$(l:湍动速度场相关长度,L:光子平均自由程)不再满足,即湍动速度场具有一定的相关长度时,微观湍动模型不再适用,需要用更一般的处理湍动云的方法. 我们在本书下册"分子云"一章中将要详细讨论它们. 本节介绍的方法是研究更一般问题的基础.

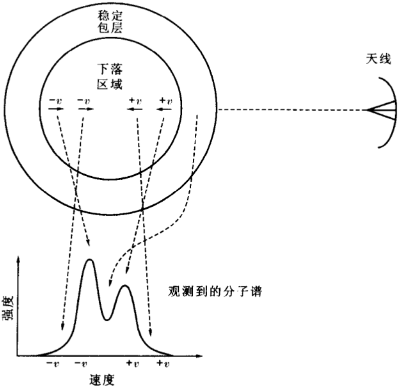


图 3.16 一个正在自里向外塌缩云的谱线轮廓及其各部分特征起源的示意图

参 考 资 料

[1] Winnewisser G, Churchwell E, Walmsley C M. In: Chantry G W, ed. Modern aspects of microwave spectroscopy. London: Academic Press Inc, 1979. 313.

[2] Genzel R. In: Pfenniger D, Bartholdi P, ed. The galactic interstellar medium. Berlin: springer-Verlag, 1992. 275.

[3] Elitzur M. Astronomical masers. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1992.

[4] Emerson D. Interpreting Astronomical Spectra. Chichester: John Wiley and Sons, 1996.

[5]Winnewisser G,Ungerechts H. In:Kessler M F,Phillips J P,ed. Galactic and extragalactic infrared spectroscopy. Dorderecht:Reidel,1984. 177.

[6] Jura M. In Hollenbach D J, Thronson H A, ed. Interstellar Processes. Dorderecht:Reidel,1987. 3.

[7]Kawamura A,Onishi T,Yonekura Y,et al. ApJS,1998,117:387.

[8]Sato F,Mizuno A,Nagahama T. ApJ,1994,435:279.

[9]Dickman R L. ApJS,1978,37:407.

[10]Frerking M A,Langer W D,Wilson R W. ApJ,1982,262:590.

[11]Nagahama T,Mizuno A,Ogawa H. AJ,1998,116:336.

[12]Warin S,Castets A,Langer W D,et al. A&A,1996,306:935.

[13]Sun J,Shen J J,Sun Y C,et al. Science in China(Series A),2002,45(2):264.

[14]Castets A,Langer W D. A&A,1995,294:835.

[15]de Jong T,Dalgarno A,Boland W. A&A,1980,91:68.

[16]Castor J I. MNRAS,1970,149:111.

[17]Sobolev V V. Moving Envelope of Stars. Translated by Gaposchkin S. Cambridge:Harvard Univ Press,1960.

[18]Goldreich P,Kwan J. ApJ,1974,189:441.

[19]Ivanov V V,Sherbakov V T. 1965,Astrophys,1965,1:17.

[20]Langer S H,Watson W D. ApJ,1984,284:751.

[21]Elitzur M. Rev Mod Phys,1982,54(4):1225.

[22]孙锦,毛信杰．北京师大学报(自然科学版),1990,26(2):36.

[23]孙锦．分子天体物理学导论讲义．北京:北京师大天文系,1991.

[24]Kwan J,Sanders D B. ApJ,1986,309:783.

[25]Zhen Q,Sun J,Lou G. A&A,1987,172:299.

[26]Phillips T G,Huggins P J,Wannier P G,et al. ApJ,1979,231:720.

[27]Sun J,Kwok S. A&A,1987,185:258.

[28]van Blerkom D. Modern Studies of Stellar Atmosphere, a Course of Lectures given at Dept. of Astronomy,Beijing Normal Univ,1985.

[29]van Blerkom D. In:Bappu M K V,Sahade J,ed. IAU Symp. 49:Wolf-Rayet and High-Temperature Stars. Dordrecht:Reidel,1973. 165.

[30]Kuiper T B H,Knapp G R,Knapp S L,et al. ApJ,1976,204:408.
[31]Falgarone E,Phillips T G,ApJ,1990,359:344.
[32]Leung C M,Liszt H S,ApJ,1976,208:732.
[33]Liszt H S,Leung C M,ApJ,1977,218:396.
[34]Leung C M,ApJ,1975,199:340.
[35]唐源,张承岳,向德琳．紫金山天文台台刊,1983,2(3):73.
[36]Kwan J. ApJ,1978,223:147.
[37]Zhou S. ApJ,1992,394:204.
[38]Zhou S. ApJ,1992,404:232.
[39]Evans Ⅱ N J,Ann Rev A&A,1999,37:311.

第四章　天体脉泽辐射的基本理论

§4.1　概述

在已发现和证认的几千条谱线中，有一部分谱线具有超强的和窄的谱线特征，一般认为他们是由受激辐射放大机制引起的. 从目前已证认的谱线看，它们几乎都分布在厘米波和毫米波范围，故称其为“脉泽”，或天体微波激射. 自 1965 第一次发现星际 OH 的强发射，1966 年被证认为天体脉泽以来，30 多年过去了，在这期间天体脉泽的观测与理论研究得到了极其迅速的发展，天体脉泽已经成为天体物理学中的一个重要的研究分支，一个极其吸引人的研究领域. 为了对这一领域几十年的发展有一个全面和深入的了解，我们在这里向读者推荐一批极好的评述文章、专题报告和专著，即参考资料[1～14].

到目前为止，在恒星形成区或晚期演化星的包层中已观测到了 3000 多个脉泽源，它们主要是由 OH，H_2O，SiO 和 CH_3OH 等 4 种分子的微波激射引起的. 20 世纪 80 年代后又发现了许多新的脉泽分子和脉泽谱线，如 H_2CO，HCN，NH_3，SiS 以及同位素脉泽 ^{29}SiO，^{30}SiO 和 $H^{13}CN$ 等. “脉泽”作为一种极端的非平衡现象，给我们提供了研究一些特殊的天文环境，特别是小尺度环境的物理和动力学条件的最好工具. 因此，随着甚长基线(VLBI)技术的进步，脉泽观测和理论研究也有了很大的发展. 并且可以预期，随着下一个 10 年空间 VLBI 的进展，天体脉泽的研究必将对加深人类对天体结构和演化的认识产生不可估量的影响.

在我们开始介绍脉泽的基本理论前，为了更好地理解天体脉泽的发现及其研究的重要意义，简单地回顾一下天体脉泽的发现简史和早期研究是很有意义的.

4.1.1　天体脉泽的发现简史及其早期研究

1965 年，当 Weaver 等以 H Ⅱ 区 W3 为背景搜巡 OH 分子的吸收线时，意外地发现 OH 在 1665 MHz 频率上有强的并且高度偏振的发射. 同时，还注意到在 18 cm 波长上 OH 的 4 条谱线(1612，1665，1667 和 1720 MHz 谱线)的强度比明显地偏离热动平衡. Weaver 等称这种超强的在 1665 MHz 上的辐射为 "mysterium"[15]. 它就是后来人们证认的第一个天体脉泽. 干涉仪的测量对证明这类强发射来自于脉泽具有决定的作用. 英国和美国的连线干涉仪实验还表明，天体脉泽的谱特征在空间上是分离的. 利用美国和瑞典组成的长基线干涉仪 Moran 等还测得 OH 脉泽是由许多源斑组成的，这些源斑的尺度仅几个毫角秒，而亮温度却高达 10^{12} K[16]. 以后又在许多银河系的 H Ⅱ 区方向发现了 OH 脉泽. 1968 年，第一次在一批列于 2μ 巡天星表上的红外源中发现了 OH 脉泽. 这些红外源大都是处于恒星演化红巨星阶段的长周期变星[17]. 由此可见，天体脉泽和恒星演化的两个关键阶段——早期与晚期密切成协. 除了最早发现的 OH 最低转动能级 $^2\Pi_{3/2}$，$J=3/2$ 的 4 条脉泽线外(按频率分别对应 $F=1-2$；$F=1-1$；$F=2-2$ 和 $F=2-1$)，OH 的更高转动能态和更高跃迁频率的脉泽谱线，如：$^2\Pi_{3/2}$，$J=5/2$，$F=2-2$ (6 030.7 MHz)；$J=5/2$，$F=3-3$ (6 035.1 MHz)；$J=7/2$，$F=4-4$(13 441.4 MHz)；和 $^2\Pi_{1/2}$，$J=1/2$，$F=0-1$ (4 660.4 MHz)；$J=1/2$，$F=1-0$(4 765.6MHz) 等也被探测到了.

1969 年，在 Berkeley 工作的 Charles Townes 研究小组发现了第二个天文脉泽分子—— H_2O(脉泽发生在正水分子的 6_{16}和

5_{23}两个能级间，辐射频率为 22.2 GHz)[18]. H_2O 脉泽的早期探测就已经揭示，H_2O 的脉泽谱具有非常宽的速度范围（10～100 km・s^{-1}）. 它们与恒星形成区成协. 此外，和 OH 脉泽一样，在晚型星的包层中也探测到了 H_2O 脉泽. 银河系中最强的 H_2O 脉泽源是 W49. 在 W49 中，在仅 50 kHz 的带宽内，H_2O 脉泽发射的能量竟高达太阳在整个电磁波谱内发射的总能量. 对 H_2O 的 VLBI 观测还揭示，H_2O 脉泽源斑的尺度小于几个毫角秒[19].

其它几种强的天文脉泽也陆续观测到了. 如 1974 年 Snyder 和 Buhl 在恒星形成活动区—— Orion-IRC2 发现了在相当长时期一直是惟一的一个星际 SiO 脉泽（即 SiO 的 $v = 1$, $J=2-1$ 的 86.2 GHz 脉泽）[20]. 而另外两个恒星形成区 W51 和 Sgr B_2 MD5 中的 SiO 脉泽是到 1985 年后才找到的[21]. 绝大部分（约 200 个）SiO 脉泽是在晚期演化星拱星包层中观测到的. 第一次的甲醇发射则是 Ball 等人于 1970 年在银心发现的[22]. 更多的发射线由 Barrett 等人于 1971 年在 Orion-KL 区域观测到. 它们是甲醇分子在 25 GHz 上的 $J_2 \rightarrow J_1$ 的 E 型发射[23]. 稍后由 Chui 等人确认为脉泽[24]. 以后 10 年有关甲醇脉泽的搜寻一直没有多大进展. 但 80 年代中期后却在恒星形成区内发现了一大批新的甲醇分子谱线. 例如在 834 MHz～350 GHz 频段内就发现了近 200 条 CH_3OH 的谱线，其中 20 多条谱线具有脉泽发射的性质. 最强的 6.7 GHz 上的甲醇脉泽是 1991 年由 Menten 探测到的[25]. 目前在恒星形成区发现的甲醇脉泽已超过 200 多个. 但是在晚型恒星的包层中却仍未找到它们.

近几年来又发现了一批新类型的脉泽. 如亚毫米波的 H_2O 脉泽以及 NH_3 脉泽等. 最早关于星际空间可能有 NH_3脉泽活动的研究是由 Wilson 等人进行的[26]. 然而第一次明确的脉泽特征是 Madden 等人在几个恒星形成区发现的 NH_3 在 $(J,K)=(9,6)$上的强发射[27]. 和 CH_3OH 一样，NH_3 也是谱线丰富的分子. 探测

NH_3 的反演-转动谱线的最好样本源也是 Orion-KL，在那里发现的 NH_3 反演线数竟高达 34 条[28]. 自 1986 年来，已经发现了 11 个星际 NH_3 脉泽. 人们预期，不久 CH_3OH 和 NH_3 脉泽将与 3 种"经典的"脉泽——H_2O，OH 和 SiO 脉泽具有同等重要的地位.

1987 年 Guilloteau 等人在富碳的晚型星 CIT6 中发现了 HCN 的 $J=1-0$ 的脉泽发射[29]. 两年后 Lucas 和 Cernicharo 又在另一个富碳星 IRC10216 中观测到 HCN 的 $J=2-1$ 的脉泽[30]. 由于 HCN 是在富碳星包层中发现的第一个脉泽分子，且数目较多，因此 HCN 已被看成示踪富碳星包层的可靠探针. 近 10 余年来，还发现某些与晚期演化星(如 AGB 星，post-AGB 以及 PPN)成协的 OH 和 H_2O 脉泽谱具有非常大的速度范围(100～300 km · s^{-1})和类似年轻星附近常见的双极几何学[31~33]，从而被认为是一类新的非寻常的拱星脉泽. 另一类新类型的脉泽是在双星系统 MWC349 中发现的氢的 $H_{29\text{-}31\alpha}$的复合线脉泽[34].

在对银河系脉泽获得许多有价值的研究结果后，天文学家又把望远镜转向了河外星系. 1973 年，Whiteoak 和 Gardner 首先在河外星系 NGC253 中[35]，接着 Rieu 等人(1976 年)又在 M82 中[36]观测到 OH 脉泽. 这些脉泽的各向同性光度比银河系最亮的 OH 脉泽还要高出 10～100 倍. 第一个河外 H_2O 脉泽则是 Churchwell 等(1977 年)在本地星群的一个旋涡星系 M33 中发现的[37]. 该脉泽的各向同性光度约为 $0.2L_\odot$. 而典型的银河系 H_2O 脉泽的光度约为 $10^{-3}\ L_\odot$. 银河系最强的 W49 中的 H_2O 脉泽，其光度约为 $1\ L_\odot$.

在河外星系中还观测到了 OH 和 H_2O 的超强脉泽. 它们同时还具有极强的远红外辐射. 如 1982 年在河外 IC4553 中发现的 OH 脉泽，其辐射强度(各向同性光度约为 $10^3\ L_\odot$)是银河系最强 OH 源(W3OH)强度的 10^6 倍[38]，故人们称其为超脉泽(megameser). H_2O 分子的河外超脉泽也观测到了. 最突出的是

NGC3079,其脉泽光度高达 $520L_{\odot}$[39a,b]. 目前已发现了 50 多个 OH 河外超脉泽. Henkel 根据它们的各向同性的光度把它们分成 kilo-脉泽($10^{-3}\sim 1\ L_{\odot}$), mega-脉泽($1\sim 10^{3}\ L_{\odot}$)和 giga-脉泽($>10^{3}\ L_{\odot}$)[40]. 由于河外 OH 超脉泽常与活动星系核成协,OH 的河外超脉泽示踪了一种新类型的活动星系核. 它们的 OH 谱线从 18 cm 红移到了 21 cm. 最亮的 OH 脉泽原则上将在最大的红移上发现. 这就意味着人们将有可能在河外找到更多、更强的脉泽,即所谓 gigamasers(我们且称其为巨脉泽). CH 和 H_2CO 分子的河外超脉泽也观测到了[41]. 而这两种分子的脉泽活动在银河系中却是很少见的.

总之,脉泽发射已经在许多不同种类的天文分子,包括 H_2O, SiO, CH_3OH, NH_3, CH, HCN 以及 H_2CO 中被探测到了. 涉及的波长范围约为 1 mm～30 cm. 脉泽存生的环境也极其多样,如:彗星、分子云、恒星形成区、晚型星、超新星遗迹以及红移 Z 一直大到 0.265 的星系等. 更有甚者,OH,H_2O 等超脉泽还被用来示踪宇宙中超大黑洞的存在(参看 1.2.3 节).

脉泽观测的深入曾激发起一次又一次的理论研究热潮. 脉泽发射的第一个理论模型是 1966 年 Perkins 等和 Litvak 等建立的[42,43]. 这些模型解释了脉泽的高亮温和偏振特性,提出了脉泽发射的紫外抽运机制. 有关脉泽的早期的经典的系列工作则是由 Peter Goldreich 和他的同事们完成的(1972—1974 年). 他们的工作涉及脉泽的辐射转移、偏振乃至抽运等一系列脉泽理论中的最重要的问题[44~47]. Goldreich 等人的工作至今仍是天体脉泽理论的基础,是从事脉泽研究的学生所需要了解的[48]. 另一个早期贡献,并且被证明具有持久意义的是 de Jong(1973 年)对 H_2O 脉泽所提出的抽运框架[49]. 它形成了现在模型的基础. Strelniskii 和 Syunyaev(1973 年)则第一次提出 H_2O 脉泽的高速特征的发现意味着恒星形成区中有高速的质量外流存在[50]. 这是在许多年后大

批 CO 外向流发现前最早的关于分子云中高速气体现象的探讨. 脉泽的理论研究涉及脉泽的激发、偏振谱的特性以及脉泽源的结构、运动和演化等许多方面. 这方面的研究工作在近 20 年来有很大的发展,我们将在本书下册中作介绍.

4.1.2 天体脉泽的基本特征和分类

1. 天体脉泽的基本物理特征

由于天体脉泽和通常在分子云或分子包层中观测到的热谱线的辐射机制完全不同,因此脉泽的许多基本物理特性与热谱线相比也表现出很大的差异. 随着 VLBI 孔径综合和高分辨率的频谱观测的开展,绘制出了越来越多的高空间分辨率的脉泽源射电图以及具有细节结构的脉泽频谱图样. 这些资料为研究脉泽源的空间分布、位形、视尺度以及运动学提供了有力手段. 归纳起来,天体脉泽的物理特征主要有:

(1) 天体脉泽大多具有成团或成块特性,我们称其为脉泽源斑. 单个源斑的最小尺度只有一个天文单位(约 10^{13} cm),或者说约 10^{-4}～1 角秒的角直径. 而与晚型星成协的 SiO 脉泽源斑则更小,大约只有 0.1～0.6 天文单位.

(2) 天体脉泽频谱的形态多样. 从最简单的只包含一个特征的谱到可以包含上百个谱特征的非常复杂的谱. 每个谱特征的线宽很窄,约 0.1～3 $km \cdot s^{-1}$. 脉泽特征的速度宽度与整个脉泽发射速度之比约为 1/5 ～ 1/50. 当存在高速外向流时,此比值很小.

(3) 脉泽源斑的角直径虽小,但辐射的亮温度 T_B 却很高. 对于银河系脉泽而言,该值大约在 10^9～ 10^{15} K 间.

(4) 许多天体脉泽具有偏振性. 如来自恒星形成区的 OH 脉泽辐射的偏振度可以高达 100%.

(5) 几乎所有的脉泽源都具有程度不同的时变. 最短的脉泽时变周期为天,最长的是几年. 有的脉泽还具有突然爆发的现象,

如 W51 MAIN 中的 H_2O 脉泽.

为了便于比较,表 4.1 同时列出了非脉泽辐射的相应特性.

表 4.1　脉泽和非脉泽辐射特性比较[3]

特征量	脉 泽	非脉泽
谱线宽度($km \cdot s^{-1}$)	0.1～3	2～100
分立谱特征数目	1～100	很少
偏振度(%)	0～100	不清楚
大小(角秒)	10^{-4}～ 1	10^2～ 10^4
亮温度 T_B(K)	10^9～ 10^{15}	< 100
时变尺度	几天、几周、几月、几年	> 几年

天体脉泽独特的物理特征大多可以通过标准的脉泽辐射理论得到解释. 我们将在本章第三节中详细讨论.

2. 天体脉泽的观测分类

(1)天体脉泽可分为两类. 一类产生于恒星形成区,一类产生于晚型星的拱星包层. 由于历史上的原因,通常称前者为星际脉泽,后者为恒星脉泽. 还有一类脉泽是在行星和彗星大气中观测到的. 前两类脉泽是我们研究的重点.

由于强的脉泽活动必须发生在气体密度相当高(约 10^5～10^{11} cm^{-3}),又有足够抽运能量(≥10^4 $L_\odot$)的地方,因此与 H Ⅱ 区成协的脉泽源常常也是与新形成的大质量星(O、B 型星)成协. 正是这些明亮的天体提供了脉泽活动所要求的高的抽运能量,而脉泽分子也正适于处在这些正在形成恒星的高凝聚的星际材料中. 故此称这一类脉泽为星际脉泽. 星际脉泽主要有 H_2O 脉泽、OH 脉泽和 CH_3OH 脉泽. 星际脉泽产生于恒星形成区. 它是大、中质量星

正在形成的一个标志．也是主序前星质量外流阶段的一个重要表现形式．观测表明，一些正在形成和刚形成的星，其周围有致密的 HⅡ 区、脉泽源、热分子发射区、分子外向流和近红外、远红外源．通常 H_2O 脉泽和最年轻的天体成协．近年来在最年轻的原恒星，即所谓的 Class—0 源附近也探测到了 H_2O 脉泽[51]．而 OH 脉泽源则常和尺度小于 10^{17} cm 的致密 HⅡ 区成协．因此研究星际脉泽为我们研究恒星形成环境和恒星早期活动提供了有力的手段．

与主序后星（如晚型的 Mira 变星、半规则变星和超巨星等）成协的脉泽源，有的处于湍动的恒星光球附近，有的处于包围这些恒星的温度相对低，密度相对高的壳层中．显然这类脉泽源的分子是来自重新回到星际环境的恒星材料，故称它们为恒星脉泽．有的文献中称其为拱星脉泽．由这类脉泽的强度、速度可以得到成协恒星的质量流失率、星周包层的物理状态和运动学结构．恒星脉泽主要有 SiO 脉泽、H_2O 脉泽、OH 脉泽和 HCN 脉泽．前三种脉泽主要与富氧的晚型星成协，最后一种和富碳星成协．鉴于在所有类型的富氧 AGB 星（从光学可见的 Mira 星到光学不可见的 OH/IR 星以及红超巨星）的拱星包层中都观测到过 SiO 脉泽，因此它被认为是最典型的恒星脉泽．

(2) 对于某些确定种类的脉泽常常还有进一步的分类．如Ⅰ-型 OH 脉泽和Ⅱ-型 OH 脉泽以及Ⅰ-型 CH_3OH 脉泽和Ⅱ-型 CH_3OH 脉泽．

与 HⅡ 区成协的基态 OH 脉泽（$\lambda \approx 18$ cm）主要是主线1 665 MHz 和1 667 MHz 脉泽，其中 1665 MHz 的 OH 脉泽更强．习惯上称与 HⅡ 区成协的基态 OH 脉泽为Ⅰ型 OH 脉泽．与晚型星成协的基态 OH 脉泽，特别是当质量流失率较大时主要是1 612 MHz 辅线脉泽，并表现出明显的双峰谱型．对于这一类 OH 脉泽，人们习惯称它为Ⅱ-型 OH 脉泽．这类星被称作 OH/IR 星．应该看到的是近十几年来在晚型的 Mira 星，甚至在不少光学厚的 OH/

IR 星的拱星壳层中也观测到了 OH 的主线脉泽. 前者常被称作是 I-OH Miras.

星际 CH_3OH 也可分成两类. Ⅰ-型 CH_3OH 脉泽主要指甲醇的 25 GHz $J_2 \rightarrow J_1 (J=2,3,4,\cdots)$ 的 E 型脉泽线和一些其它的毫米波跃迁. Orion-KL 中的甲醇脉泽是Ⅰ-型 CH_3OH 脉泽的原型. Ⅰ-型 CH_3OH 脉泽通常偏离极端致密 HⅡ区 0.1～1 pc 的距离. Ⅱ-型 CH_3OH 脉泽则主要表现为在 12 GHz 的 $2_0 \rightarrow 3_{-1}$ 的 E 跃迁以及极强的又分布很广的甲醇 6.7 GHz 的 $5_1 \rightarrow 6_0$ A^+ 的脉泽线. Ⅱ-型 CH_3OH 脉泽还包括一些其它的高频谱线. 干涉仪的观测已证明Ⅱ-型 CH_3OH 脉泽处在超致密的 HⅡ区的稠密包层中. W3(OH)是Ⅱ-型 CH_3OH 脉泽的原型. 此外 CH_3OH 分子中的 OH 相对 CH_3 有 3 个势阱,这就导致了 3 种类型的甲醇,分别记作 E 型,A^+型和 A^-型甲醇. 对于 E 型甲醇的转动态用 J_K 表示. 对于 A 型甲醇用 $J_{|K|}$表示,即转动能级对于 $\pm K$ 是简并的.

§4.2　脉泽辐射的一般概念

4.2.1　脉泽辐射产生的条件

脉泽(maser)是辐射的受激发射的微波放大. 早在 1917 年爱因斯坦就提出除了自发发射外,还存在另一种谱线发射机制,即受激发射. 20 世纪 50 年代人们曾成功地利用受激发射原理制成了脉泽(微波激射器)和莱塞(光激射器). 然而,通常见到的以原子和分子为特征的单色辐射都是自发发射性质的. 这可通过辐射场与物质的相互作用来证明.

在辐射转移方程　$\dfrac{dI_\nu}{ds} = -\kappa_\nu I_\nu + j_\nu$　中

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu}{4\pi}\int_0^\infty [\, n(E-h\nu)\, B_{E-h\nu,E} - n(E)\, B_{E,E-h\nu}]\mathrm{d}E \tag{4.2.1}$$

$$\frac{n(E)}{n(E-h\nu)}=\frac{g(E)}{g(E-h\nu)}\mathrm{e}^{-h\nu/kT} \qquad (4.2.2)$$

$$g(E)=\frac{n(E)}{NF(E)}$$

式中 $F(E)$是粒子在动量空间的概率分布．在热动平衡(TE)下，

$$F(E)=\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-E/kT} \qquad (4.2.3)$$

利用关系 $g(E)\,B_{E,E-h\nu}=g(E-h\nu)B_{E-h\nu,E}$，有

$$\kappa_\nu=-\frac{Nh\nu}{4\pi}\int_0^\infty\left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}E}\right)h\nu\,B_{E,E-h\nu}\,g(E)\,\mathrm{d}E \qquad (4.2.4)$$

由于 $\mathrm{d}F/\mathrm{d}E<0$，故 $\kappa_\nu>0$.

因此，在 TE 下，辐射场与物质相互作用的结果总是净吸收．或者说受激发射与吸收平衡的结果总是能量损失的．也即通常见到的谱线总是自发性质的．当出现反常情况，极端偏离热动平衡(TE)时，$\mathrm{d}F/\mathrm{d}E$ 将由<0 变成>0.

当 $\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}E}>0$ 时 $\begin{cases} E\uparrow \text{则 } F(E)\uparrow, n(E)\uparrow\text{，粒子数按能级布居反转.} \\ \kappa_\nu<0\text{，负吸收或净放大.}\end{cases}$

所以脉泽是粒子非热平衡的结果．布居数反转是产生脉泽辐射的先决条件．脉泽作为一种极端的非平衡现象，提供了我们研究一些特殊物理条件的手段．

4.2.2 反转与激发温度 反转与脉泽增益

在热动平衡下能级布居数之比服从 Boltzmann 关系(4.2.2)式，或写成

$$\frac{n_2g_1}{n_1g_2}=\mathrm{e}^{-h\nu/kT_{ex}}$$

n_2 和 n_1 分别表示上、下能级的粒子数密度．因为 $n_2\,g_1<n_1\,g_2$，所

以激发温度 $T_{ex}=\frac{h\nu}{k}\Big/\ln\left(\frac{n_1g_2}{n_2g_1}\right)>0$.

在非热平衡下，当 $g_1\neq g_2\neq 1$ 时，布居反转要求 $n_2g_1>n_1g_2$（或者说 $n_2/g_2>n_1/g_1$，即在简并情况下，子能级间布居数反转）. 另一种偏离 TE 的情况是布居负反转，即 $n_2g_1\ll n_1g_2$. 由 Boltzmann 关系来看，称为能级的过冷布居，如在 H_2CO 中见到的情况.

在布居反转情况下，由于 $n_2g_1>n_1g_2$，所以激发温度 $T_{ex}<0$. 同样，谱线光厚

$$\tau_\nu=\frac{hc}{4\pi g_1}(n_1g_2-n_2g_1)B_{21}\frac{\partial l}{\partial v}<0$$

由(3.1.6)式可知，源函数 S_ν 也小于 0. 以后还可证明，不饱和脉泽的出射强度 $I_\nu\propto I_0e^{|\kappa_\nu z|}=I_0e^{|\tau_\nu|}$. 饱和脉泽 $I_\nu\propto I_s|\kappa_\nu z|=I_s|\tau_\nu|$. 所以 τ_ν 在此具有增益的意义. 我们也称它为脉泽增益. 它与脉泽光子相互作用的相干路径长度 z 有关. 对于实验室脉泽是通过谐振腔中多次的反射来达到脉泽运转所要求的相干路径的. 然而实验室脉泽必须考虑对场模的选择，条件苛刻. 在天文环境下产生脉泽所需要的布居反转不是很困难的. 实际上许多星际分子都表现出粒子数的反转. 这是因为天文环境下的气体密度和尺度与地球条件相差太大. 在星际空间极低密度下，很容易达到 $C_{21}<A_{21}$，以致能级偏离热布居. OH，H_2O，SiO 和 CH_3OH 是至今发现的最强的星际或恒星脉泽，其次有 NH_3，CH，HCN 和 H_2CO 脉泽等. 许多其它的天文分子也表现出粒子布居数的反转，并产生了非热的脉泽效应. 但这些分子由于缺乏足够的光学厚度(即脉泽增益)，以致脉泽作用不强. 由 τ_ν 的表达式可知，即使能级布居反转较强，但如果速度场梯度太大或爱因斯坦辐射跃迁概率太小也不可能得到可观测的脉泽效应.

4.2.3 饱和

脉泽发射是一种受激发射，假设 $g_1 = g_2$，且布居达到反转后，在忽略热碰撞项时，有

$$n_2(A_{21} + B_{21}J(\nu_{21})) > n_1 B_{12} J(\nu_{21})$$

即发射光子数大于吸收光子数. 当 $A_{21} \ll B_{21}J(\nu_{21})$时，受激发射占支配地位，我们称这种源为脉泽源或微波激射源. 只有保持 $n_2 > n_1$，才能维持受激辐射放大. 然而单靠两能级系统是不可能实现反转的. 这是因为热碰撞跃迁总是向下的概率大于向上的概率，总是使粒子布居趋于下能级，最多是 $n_2 \to n_1$. 当 $n_2 \approx n_1$，称为饱和（有关饱和的深入讨论见以后的章节）.

在两能级达到细节平衡时，有

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{B_{12}J(\nu_{12}) + C_{12}}{A_{21} + B_{21}J(\nu_{21}) + C_{21}}$$

一般总是 $n_2 < n_1$，当 $B_{21}J(\nu_{21}) \gg A_{21}, C_{21}, C_{12}$时（这在平均辐射场强度 $J(\nu_{21})$很大时可实现），忽略 A_{21}, C_{21}, C_{12}，得

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{B_{12}J(\nu_{12})}{B_{21}J(\nu_{21})}$$

由于假设 $g_1 = g_2$，所以 $B_{21} \approx B_{12}$，$n_2 \approx n_1$. 然而实际上总有 A_{21}，C_{21}，C_{12}存在，所以若无其它能级和抽运机构，即使 $J(\nu_{21})$很强，n_2总是稍小于 n_1 的. 导致脉泽能级布居数反转的机构就称为抽运机构. 最简单的抽运机构是三能级模型.

4.2.4 三能级抽运模型

假定有 E_1, E_2和 E_3 3 个能级，E_1, E_2为“脉泽”工作能级. E_3可以是一个具体的第三能级，也可作为脉泽系统的一个能源储存器(reservoir)包含许多能级. 这样就构成了一个三能级的抽运框架. 抽运的净效应就是要通过第三态 E_3 将分子从较低能态激发到较

高能态.例如若脉泽发生于基态,但与较高的振动或转动能级通过红外跃迁相联系,而选择定则或跃迁概率又有利于更多的分子衰变到基态的较高能级,此时反转就可发生(见图 4.1).

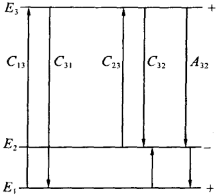


图 4.1　三能级抽运模型

此时,跃迁频率 $\nu_{21}=\dfrac{E_2-E_1}{h}$,处于微波波段(对应脉泽跃迁);$\nu_{32}=\dfrac{E_3-E_2}{h}$,处于红外波段.

假定 E_1,E_3 能级宇称相同,属于禁戒跃迁.这样 E_1,E_3 能级间没有电偶极跃迁相联系. 但在两个脉泽能级与 E_3间有碰撞耦合,同时假定脉泽能级间的碰撞和自发辐射过程可以忽略. 这样通过 $E_1\rightarrow E_3$ 的碰撞激发和 $E_3\rightarrow E_2$ 的辐射衰变有可能实现能级 E_1,E_2 间的布居反转. 下面作一个定性分析.

通常能级 E_2,E_1 间的自发跃迁概率是很小的. 如 OH 的 18 cm 波长上的脉泽,其 $A_{21}\approx 7\times 10^{-11}\ \mathrm{s}^{-1}$,$H_2O$ 的 1.35 cm 波长脉泽,其 $A_{21}\approx 2\times 10^{-9}\ \mathrm{s}^{-1}$. 然而对于 E_3,E_2 间的跃迁,由于 $\nu_{32}\gg\nu_{21}$,又 A 与 ν^3成正比,因此 A_{32}远大于 A_{21}. 如对于 OH 抽运,相应的 $A_{32}\geqslant 0.1\ \mathrm{s}^{-1}$,对 H_2O, $A_{32}\geqslant 1\ \mathrm{s}^{-1}$. 故此, A_{32}在脉泽能级布居反转中起了关键的作用. 此外由于 C_{32}和 C_{31}基本相同,令其为 C. 并假定 $A_{32}\gg C$,这样分子几乎不能停留在 E_3能级上,即 $n_3\approx 0$,于是造

成 $n_2 > n_1$. 若此时有一个外部的频率为 ν_{21} 的辐射场加于分子源，且有 $J(\nu_{31}) \approx J(\nu_{32}) \approx 0$ 的条件，便可得到受激辐射放大. 当脉泽频率上的辐射场强度(包括外来的和脉泽本身的)变得很大时，它就增大了分子离开能级 E_2 的速率，使其由 $n_2 > n_1$ 变为 $n_2 \rightarrow n_1$. 当 $n_2 \approx n_1$(即上能级被耗尽)时，无论再如何增加 $J(\nu_{21})$，粒子数按能级分布将不再改变. 即脉泽达到饱和. 此时从能级 E_1 碰撞抽运到能级 E_3 的粒子，通过自发衰变到能级 E_2，接着通过一个脉泽光子的发射达到一个稳定的循环. 因此在脉泽饱和时，发射光子的数目变得与平均辐射场强度 J_ν 无关，也即与辐射转移方程中的 I_ν 无关.

以上讨论忽略了 E_2，E_3 能级间的受激跃迁. 实际认为 $J(\nu_{32}) = 0$. 然而对于真实的脉泽源讲，并不符合. 另外即使 $J(\nu_{32}) = 0$，$E_3 \rightarrow E_2$ 的自发发射也会造成一个非零的辐射场 $J(\nu_{32})$，它被周围的分子吸收后将减少 E_2 能级的布居数. 减少的程度与 ν_{32} 上的光深有关. 显然，ν_{32} 上的跃迁光薄时对保持 n_2 和布居数反转有利. 而 ν_{21} 上的大的光厚则有利于脉泽放大.

三能级抽运模型虽是最简化的模型，但在天文上仍不失其实际的意义. 此外，通过三能级模型我们还可以获得不少有关脉泽过程的基本物理图像. 至于脉泽的抽运功率可以来自于辐射和碰撞，也可以来自其它形式. 导致脉泽能级布居反转的机构叫抽运机构. 三能级模型就是一个最简单的抽运机构. 实际上一个脉泽抽运循环的建立，总是要涉及大量能级的跃迁过程. 既要考虑脉泽的激发机制(泵源)，也要有使脉泽下能级迅速弛豫的机构(如辐射衰变、碰撞衰变等). 另外还需考虑到脉泽辐射的转移效应. 脉泽源区还必须有足够的速度相干性，相干的路径长度或相干的柱密度. 只有这样才能保持脉泽放大所要求的增益，从而得到可观测的脉泽效应. 星际条件提供了偏离热动平衡所需要的低密度和高的脉泽放大所需要的大的柱密度. 由于脉泽放大依赖于相干的路径长度，致

使脉泽辐射更趋向于集束的(beamed)[52],即强的辐射方向性.

小结:使一个脉泽能够运转的基本条件是:(1) 涉及脉泽跃迁的能级粒子数反转;(2) 存在一个与脉泽气体处于非热平衡下的热源(同时也要考虑一个冷源);(3)有足够高的脉泽分子丰度;(4)沿脉泽柱有足够的速度相干性(或相干柱密度);(5)合适的气体密度,使其既可提供碰撞激发的效应,又不致造成布居的热化.

§4.3　天体脉泽的辐射理论

从前面的定性介绍和本节将要展开的讨论来看,都涉及到一个重要的问题,即以前讨论过的公式或方程(见第三章),对天体脉泽情况下的辐射场和分子能级布居数的分布是否还适用. 遗憾的是这样一个重要的问题自 Litvak 和 Goldreich,Keeley,Kwan 之后还没有在理论上专门地研究过. 在观测上也还不足以提供在一个单个的脉泽特征中辐射场统计性质的结论性信息. Elitzur 曾指出,脉泽辐射场的统计学性质是天体脉泽理论的基础.从理论上和观测上进行更多的研究是非常必要的[12]. 在某些一般性的假设下,计算的结果表明,脉泽系统的辐射场和能级布居可以用一些在热的、非脉泽跃迁中曾用过的方程来描述.这就很大地简化了天体脉泽的研究. 因此,仔细地审查导致这一结论的假设是非常重要的. Elitzur 认为,虽然单个系统粒子的行为是相当不稳定的、反复无常的,但是对所有源粒子平均,可以认为天体脉泽是稳定的. 观测到的最快变化(大约几周)与有关的抽运和衰变时标相比要长得多.在处理脉泽问题时,我们同时假设它满足随机的统计学,这样,单位体积的相互作用速率可以简单地表示成一个单个粒子的相互作用速率和数密度的乘积.这种稳定的、随机统计学的假设是目前天体脉泽理论的基础. 关于脉泽统计学的进一步讨论以及脉泽辐射的相干性问题,读者可参阅参考资料[12].

天体脉泽理论的研究还将从理论上解释一系列观测到的脉泽特性，如：异常高的亮温、窄的谱线特征、小的视尺度、强的偏振和敏感的时变特性，并为建立合理的脉泽模型奠定重要的基础.

4.3.1 脉泽的辐射转移方程和统计平衡方程

1. 脉泽辐射的转移方程

在一维情况下，脉泽辐射的转移方程仍具有下面的形式，即

$$\frac{\mathrm{d}I_\nu}{\mathrm{d}z}=-\kappa_\nu I_\nu+j_\nu$$

或

$$\frac{\mathrm{d}I_\nu}{\mathrm{d}\tau_\nu}=-I_\nu+S_\nu \tag{4.3.1}$$

不过这里的 $\kappa_\nu<0$，κ_ν称为增益系数. j_ν 是自发发射系数. 若用 $n_{\rm u}$ 和 $n_{\rm l}$分别表示上、下能级的分子布居数，则形式上仍有

$$\kappa_\nu=-\left(\frac{n_{\rm u}}{g_{\rm u}}-\frac{n_{\rm l}}{g_{\rm l}}\right)g_u B_{\rm ul}\phi_\nu\left(\frac{h\nu}{4\pi}\right)$$

$$j_\nu=n_{\rm u}A_{\rm ul}\left(\frac{h\nu}{4\pi}\right)\phi_\nu \tag{4.3.2}$$

(4.3.1)式中的 S_ν 为源函数，和第三章中曾描述过的一样，$S_\nu=j_\nu/\kappa_\nu$. 通常认为它与频率无关. 假设在整个所研究的区域中，源函数为常量，则从 i 能态跃迁到 k 能态时，其辐射强度 I_{ik}和源函数 S_{ik}的关系可简单处理如下：

$$I_{ik}=I_{\rm BG}\beta_{ik}+S_{ik}(1-\beta_{ik}) \tag{4.3.3}$$

式中，$I_{\rm BG}$为背景连续源强度，β_{ik}为光子逃逸概率. 沿一个单一方向飞行的光子，其逃逸概率 $\beta_{ik}=\exp(-\tau_{ik})$. 在满足 Sobolev 近似下，有

$$\tau_{ik}=\frac{c^3}{8\pi\nu^3}A_{ik}g_i\left(\frac{n_{\rm u}}{g_{\rm u}}-\frac{n_{\rm l}}{g_{\rm l}}\right)\Big/\left(\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}l}\right) \qquad \text{(详见第三章)}$$

2. 脉泽能级的统计平衡方程

假设天体脉泽系统是由一个最简单的两能级（即脉泽工作能

级)和一个无结构的能源储存器(一般指其它能级)组成,那么整个脉泽系统的布居数将由脉泽能级和储能器之间粒子数交换的平衡来确定. 或者说脉泽的布居反转($n_u/g_u > n_l/g_l$)由布居数的速率方程解出,下面给出的是一个脉泽能级(实线)和储能器能级(虚线)间关系的示意图.

这样,脉泽上能级的速率方程是

$$\frac{\mathrm{d}n_u}{\mathrm{d}t}=P_u-n_u\Gamma_u-n_uR+n_l\frac{g_u}{g_l}R \qquad (4.3.4)$$

式中 P_u 是抽运速率,它代表单位时间、单位体积内从某个储能器进入 u 能级的粒子数;$n_u\Gamma_u$ 是衰变速率,它代表单位时间、单位体积内离开 u 能级进入其它能级的粒子数,它可以指碰撞去激发速率、自发发射速率或者其它某种过程的速率*;第 3 和 4 项分别表示受激发射和受激吸收的速率. 这里还假设了受激发射和吸收具有相同的谱线轮廓 ϕ_ν. 一个粒子的受激发射速率是:

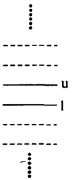


图 4.2　脉泽能级(实线)和储能器能级(虚线)关系示意图

$$R=\int\frac{B_{ul}}{4\pi}I_\nu\phi_\nu\mathrm{d}\nu\mathrm{d}\Omega=B_{ul}J_\nu \qquad (4.3.5)$$

式中 I_ν 为频率 ν 上的脉泽辐射场和外辐射场的总强度,J_ν 是平均辐射场强度$\left(\approx\frac{I_\nu\Omega}{4\pi}\right)$. 同理,脉泽下能级的速率方程为:

$$\frac{\mathrm{d}n_l}{\mathrm{d}t}=P_l-n_l\Gamma_l+n_uR-n_l\frac{g_u}{g_l}R \qquad (4.3.6)$$

---

* 有的书上是将自发过程 A_{ul}、碰撞过程(包括碰撞激发 C_{lu} 和碰撞去激发 C_{ul})以及 Γ 过程(Γ 也称损耗速率,loss rate)分开处理的[12]. 这样统计平衡方程(4.3.4)中将增加 $-n_uA_{ul}$,$-n_uC_{ul}$ 和 $n_l C_{lu}$ 等三项. 在实际处理微波激射问题时,由于 $C<B$(否则布居不能反转),$A<B$(受激总是大于自发),自发和碰撞常常是可忽略的.

式中 P_l 和 Γ_l 则分别表示脉泽下能级的抽运速率和衰变速率．如上所述，天体脉泽在比速率方程中所涉及的各种时标大得多的时间内是稳定的，因此，可认为（4.3.4）式和（4.3.6）式中的 $\mathrm{d}n/\mathrm{d}t=0$. 此时速率方程变成统计平衡方程．解这两个定态时的速率方程可得上、下能级的布居数差，即

$$\frac{n_u}{g_u}-\frac{n_l}{g_l}=\frac{\left(\frac{P_u}{g_u}-\frac{P_l}{g_l}\right)+\left(\frac{P_u}{g_u}+\frac{P_l}{g_l}\right)(\Gamma_l-\Gamma_u)/(\Gamma_l+\Gamma_u)}{\frac{2\Gamma_u\Gamma_l}{(\Gamma_u+\Gamma_l)}+2R\left(\Gamma_l+\frac{g_u}{g_l}\Gamma_u\right)/(\Gamma_u+\Gamma_l)} \tag{4.3.7}$$

若统计权重 $g_u=g_l$，衰变速率 $\Gamma_u=\Gamma_l=\Gamma$，则

$$n_u-n_l=\frac{P_u-P_l}{\Gamma+2R}=\frac{\Delta P}{\Gamma+2BJ}=\Delta n \tag{4.3.8}$$

4.3.2 不饱和脉泽和饱和脉泽　脉泽强度、亮温和光子发射率

先看方程(4.3.4)和(4.3.6)，它们在 $g_u=g_l$ 和 $\Gamma_u=\Gamma_l=\Gamma$，且定态情况下变成：

$$P_u-(n_u-n_l)BJ-n_u\Gamma=0 \tag{4.3.9}$$

$$P_l-(n_l-n_u)BJ-n_l\Gamma=0 \tag{4.3.10}$$

这里，$BJ=R$. 由(4.3.9)式与(4.3.10)式相减，同样可得方程(4.3.8). 而(4.3.9)式和(4.3.10)式相加得：

$$n_{ul}=n_u+n_l=\frac{P_u+P_l}{\Gamma}=\frac{P}{\Gamma} \tag{4.3.11}$$

在(4.3.8)式中，$2BJ$ 项随着脉泽强度的增加而不断增大．若 $2BJ \ll \Gamma$，为不饱和脉泽．此时脉泽强度还小，所以受激发射不起支配的作用．当 $2BJ \geqslant \Gamma$ 后，粒子数反转将由于受激发射而减弱，此时脉泽开始趋向饱和．到 $2BJ \gg \Gamma$ 时则达到饱和极限情况，此时微波强度远超过 Γ. 如果 Γ 主要是自发发射和碰撞去激发的贡献，则意味着 $2R \gg A, C$. 由(4.3.8)式可知，从不饱和到饱和，是一个渐变的过程，脉泽能级布居差 Δn 是渐趋减少的；到完全饱和时 $\Delta n \to$

0. 这和上一节的一般性理论一致.

令 $2BJ=\Gamma$ 时的辐射强度 $I=I_s$,我们称 I_s 为饱和强度. 此时的 $J=J_s$,显然 $J_s=\Gamma/2B$,J_s 是相应的平均脉泽强度. 由于 $J_s\approx I_s\Omega/4\pi$,因此

$$I_s=\frac{2\pi\Gamma}{B\Omega} \tag{4.3.12}$$

式中 Ω 是脉泽源角大小. 参数 J_s(或 I_s)给出了辐射场强度开始影响能级布居反转的一个尺标. 如果 $J\ll J_s$,则布居反转与脉泽辐射场完全无关. 对于不饱和脉泽,由于 $J\ll J_s$,或者 $2BJ\ll\Gamma$,此时布居反转

$$\Delta n=\Delta n_0\approx\frac{\Delta P}{\Gamma} \tag{4.3.13}$$

式中 Δn_0 称为不饱和脉泽的布居反转,也是非常低脉泽强度时的布居反转. (以后讨论中凡与不饱和有关的量均用下标"0"表示.)

如上所述,$J>J_s$(也即 $2BJ>\Gamma$)后,脉泽开始饱和. 在所有天体脉泽中,脉泽的饱和强度 J_s 大约比由自发衰变产生的源函数大 $10^5\sim10^7$ 倍[14]. 这意味着脉泽增益 $\tau(=\kappa z)$必须大到等于 $\ln10^5\sim\ln10^7$,即 11～16 左右时天体脉泽才能开始饱和.

(4.3.13)式表明,布居数反转和脉泽作用要求 $P_u>P_l$,或者说,脉泽能级的净抽运速率 $\Delta P>0$. 布居数反转过程的效率是以参数 η 为特征的.

$$\eta=\frac{P_u-P_l}{P_u+P_l}=\frac{\Delta P}{P}=\frac{\Delta n_0}{n_{ul}} \tag{4.3.14}$$

η 叫抽运效率[9],也叫反转效率[12]或脉泽效率[52]. 很明显,$-1\leqslant\eta\leqslant1$. 对于任何给定的抽运方案,$\eta$ 值取决于对特定模型所选择的物理参数. $\eta\to1$,表示最有效的抽运. 对于热谱线,$P_u<P_l$,$\eta<0$. 在 $P_u\ll P_l$ 时,有时也称作反-反转. 即第三章中讨论过的所谓过冷布居.

下面分析谱线吸收、发射以及源函数与布居反转、抽运速率以及抽运效率等量间的关系. 再次假设发射线和吸收线具有相同谱线轮廓 ϕ_ν,且上下能级统计权重相等,则谱线发射和吸收系数可分别表示为:

$$\kappa_\nu = -B_{\rm ul} h\nu (n_{\rm u} - n_{\rm l}) \phi_\nu / 4\pi$$

$$j_\nu = n_{\rm u} A_{\rm ul} h\nu \phi_\nu / 4\pi$$

由于 $2n_{\rm u} = (n_{\rm u} - n_{\rm l}) + (n_{\rm u} + n_{\rm l}) = (n_{\rm u} - n_{\rm l}) + (P_{\rm u} + P_{\rm l})/\Gamma$

故

$$j_\nu = A_{\rm ul}[(n_{\rm u} - n_{\rm l})/2 + (P_{\rm u} + P_{\rm l})/2\Gamma] h\nu \phi_\nu / 4\pi \tag{4.3.15}$$

所以若布居反转越大,抽运速率越高,谱线发射也越强. 由(3.1.8)式知,源函数为

$$S_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left(\frac{1}{\dfrac{g_{\rm u} n_{\rm l}}{g_{\rm l} n_{\rm u}}} - 1\right)$$

若假设 $g_{\rm u} = g_{\rm l}$,则

$$S_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left(\frac{n_{\rm u}}{n_{\rm l} - n_{\rm u}}\right)$$

若还有 $J \ll J_{\rm s}$ 成立(即不饱和情况),则利用(4.3.13)和(4.3.14)式可得

$$S_\nu = -\frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{\dfrac{\Delta n_0}{2} + \dfrac{P_{\rm u} + P_{\rm l}}{2\Gamma}}{\Delta n_0} = -\frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{P_{\rm u}}{P_{\rm u} - P_{\rm l}} = -\frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{\eta + 1}{2\eta} \tag{4.3.16}$$

再次证明,在布居反转情况下源函数和吸收系数、光学厚度一样也是小于零的. 另外,由(4.3.16)式可见,源函数依赖的是反转效率(抽运效率),而不是抽运速率.

脉泽辐射的布居差 Δn_0,也可转换成谱线的激发温度 $T_{\rm ex}$. 对于反转的布居,$T_{\rm ex}$ 为负. 在 Rayleigh-Jeans 近似下,有

$$\frac{n_u}{n_l}\approx 1-\frac{h\nu}{kT_{ex}}$$

则

$$T_{ex}=\frac{h\nu n_l}{k(n_l-n_u)} \tag{4.3.17}$$

因此，当布居反转时 T_{ex} 为负值．并且强的布居反转将对应小的 $|T_{ex}|$．在小的布居反转情况下，激发温度可近似表示为

$$T_{ex}\approx -\frac{h\nu n_{ul}}{2k\Delta n}$$

对于不饱和脉泽，由(4.3.11)、(4.3.13)和(4.3.14)式可推得

$$T_{ex}=-\frac{h\nu}{k}\cdot\frac{P_l}{P_u-P_l}=-\frac{h\nu(1-\eta)}{2k\eta} \tag{4.3.18}$$

可见，和源函数一样激发温度也是独立于抽运速率而惟一地由反转效率 η 所确定．

下面再来讨论脉泽谱线中心的辐射转移问题．已知不饱和脉泽的谱吸收系数为

$$\kappa_0=-\Delta n_0 B\,\frac{h\nu}{4\pi}\phi_\nu$$

在线心处，$\phi_\nu=\frac{1}{\Delta\nu_D}$，另有 $B=A\,\frac{c^2}{2h\nu^3}$，故

$$\kappa_0=-\frac{A\lambda^2\Delta P}{8\pi\Delta\nu_D\Gamma} \tag{4.3.19}$$

由(4.3.8)式得

$$\Delta n=\frac{\frac{\Delta P}{\Gamma}}{1+\frac{2BJ}{\Gamma}}=\frac{\Delta n_0}{1+\frac{2BJ}{\Gamma}}=\frac{\Delta n_0}{1+\frac{J}{J_s}}=\frac{\Delta n_0}{1+\frac{I}{I_s}} \tag{4.3.20}$$

方程(4.3.20)是脉泽过程详细研究的起始点．它提供了由基本反转框架 Δn_0．建立的反转的量值．该式还表明，布居数反转明显地随平均辐射场强度 J_ν 而变．如果在线心的辐射转移方程中(注：在

以后的频率依赖方程中，凡不带下标 ν 者表示的是线心频率）我们忽略自发发射（这在通常是可行的，如在 SiO，$J=1-0$ 跃迁中，A 系数是 $3\times10^{-6}\mathrm{s}^{-1}$，$H_2O$ 的 22 GHz 中为 $2\times10^{-9}\mathrm{s}^{-1}$；在 OH 的基态跃迁中大约为 $10^{-11}\ \mathrm{s}^{-1}$），则得

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}z}=\Delta nB\frac{h\nu}{4\pi}\phi_\nu I=\frac{\Delta n_0 B\frac{h\nu}{4\pi}\phi_\nu}{1+\frac{I}{I_s}}I=\frac{\kappa_0 I}{1+\frac{I}{I_s}}=\kappa I \quad (4.3.21)$$

所以吸收系数

$$\kappa=\frac{\kappa_0}{1+\frac{I}{I_s}}=\frac{\kappa_0}{1+\frac{J}{J_s}} \quad (4.3.22)$$

如前所述，参数 J_s给出了辐射强度开始影响布居差的一个尺度．如果 $J_\nu\ll J_s$，则布居差与辐射强度无关，且 $\kappa=\kappa_0$．这样的一个脉泽就是前面提到过的不饱和脉泽．利用不饱和脉泽的布居数还可以构造发射系数 j_0 和源函数 S_0．积分方程(4.3.21)可得

$$\ln\left[\frac{I(z)}{I(z_1)}\right]+\frac{I(z)-I(z_1)}{I_s}=\kappa_0 z \quad (4.3.23)$$

式中 $I(z_1)$是在 z_1位置上脉泽的输入强度．z_1的选取正是源函数项（与自发发射相联系）可开始被忽略的位置．在两种极限情况下：

$I\ll I_s$时， $$I(z)=I(z_1)\exp(\kappa_0 z) \quad (4.3.24)$$

$I\gg I_s$时， $$I(z)=I_s\kappa_0 z+I_1 \quad (4.3.25)$$

式中 I_1 为常数．(4.3.24)和(4.3.25)式分别说明，随脉泽传播距离，不饱和脉泽是指数放大，而饱和脉泽是线性放大．需要强调的是，不应该将饱和脉泽情况下的低的强度增长率和布居数反转的减少与高的饱和脉泽强度混淆．事实上在饱和期间的脉泽发射反映了任何抽运框架所能达到的最高效率．一个饱和脉泽总是比不饱和脉泽的发射强得多．这一点还可从下面的分析看到．首先将(4.3.25)式写成

$$I(z)=I_s\Delta n_0 B_{ul}\frac{h\nu}{4\pi}\phi_\nu(z-z_s)+I(z_s)$$

z_s 是沿射线上的一个点，在该处脉泽开始饱和. $I(z_s)$由不饱和公式(4.3.24)式计算(此时的 $z=z_s$). 饱和将在不饱和脉泽气体一个大的路径长度的末端达到，也就是在脉泽源的较外层. 因此饱和脉泽的强度总是远大于不饱和脉泽的. 饱和脉泽强度随路径 z 不再指数放大，而线性增大的性质将意味着脉泽的一些特性——辐射方向的集束性，源视尺度的减少以及谱线变窄等——在饱和区中将不再加强(详见 4.3.3 和 4.3.4 节)

(4.3.23)和(4.3.24)式的结果还说明，在源区的每一个点都可作为脉泽中任何其它点的输入源. 而从表面辐射的光子则采样了整个的脉泽. 这与热源情况有重要的差别.

在射电上习惯利用 $I=2kT/\lambda^2$关系将上述解用等效的温度来表示. 如(4.3.24)式就变为

$$T_B(z)=T_B(z_1)\exp(\kappa_0 z) \tag{4.3.26}$$

如果我们现在仍考虑辐射转移方程中的源函数项，则在任何几何学下，沿视线方向不饱和脉泽的辐射转移方程解可写成

$$T_B(z)=[T_B(0)-T_{ex_0}]\exp(\kappa_0 z)-T_{ex_0} \tag{4.3.27}$$

式中 $T_B(0)-T_{ex_0}$相当于脉泽放大的输入源. 由于 $T_{ex}<0$，所以上式也可写成

$$T_B(z)=[T_B(0)+|T_{ex_0}|]\exp(\kappa_0 z)-T_{ex_0} \tag{4.3.28}$$

式中 $T_B(0)$是照亮脉泽源背面的外部源的亮温，T_{ex_0}则与自发发射相联系. 由(4.3.28)式知，脉泽的输入辐射(种子光子)主要有两种. 一种是外部的，即背景源. 它包括：成协热源、脉泽壳层内的 H Ⅱ 区或红外星的辐射以及 2.7 K 宇宙微波背景辐射等. 一种是内部的，由上能级的自发衰变产生的辐射. 哪一种是脉泽放大的主要输入源，取决于 $T_B(0)$和 T_{ex_0}的相对大小. 如布居数差越小，越趋于饱和，激发温度越高，此时背景作为输入源越不重要. 故有人

认为，当受激发射的能量不再依赖入射辐射的能量时称为饱和．以后研究还表明背景辐射源作为输入源对河外超脉泽的作用远大于对银河系的脉泽．由于 κ_0 和脉泽能级的布居反转成正比，因此(4.3.24)式或(4.3.28)式表征的这种不饱和脉泽强度将随抽运条件的变化而指数地响应．这也是脉泽具有敏感的时变特性的一个重要原因．脉泽的指数放大性质也是天体脉泽极高亮温的直接原因．此时谱线的亮温度已远远大于脉泽区实际的运动温度*．

同理，饱和脉泽强度也可表示成亮温形式．利用 $T_B = I \cdot c^2/(2k\nu^2)$，将(4.3.12)式表示的饱和强度 I_s 代入，B 系数用 A 系数表示，最后得

$$T_s = \frac{h\nu}{2k}\frac{\Gamma}{A}\frac{4\pi}{\Omega} \tag{4.3.29}$$

T_s 是脉泽变得饱和时的亮温度．

表 4.2 给出了银河系已观测到的一些强脉泽的典型参数[9]．

由表可见，天体物理脉泽在大多数情况下是饱和的．强的天体脉泽通常是饱和的．它的主要依据，一是强脉泽发射保持了时间的稳定性．如果是不饱和脉泽，它将指数地响应在抽运速率或其它物理条件上的任何波动．二是不少脉泽源表现出不放大实际存在的背景源的辐射．

---

* 脉泽区实际温度的计算(参看参考资料[4])：以 OH 脉泽源为例．由于其自然宽度很小(约 10^{-11} Hz)，这与其几个 kHz 的观测宽度相比是可以忽略的．而源的分子密度又可能很低，以致谱线的碰撞加宽也可不计．这样观测到的谱线必然对应气体运动速度的范围，并约为 $2\nu_0\sigma(v)/c$，其中 ν_0 为线心频率，$\sigma(v)$ 为热速度标准偏差，它与运动温度关系是 $\sigma(v) = (kT_k/m)^{1/2}$，$m$ 为分子质量，对 OH 而言 $m = 2.8\times10^{-26}$ kg，如线宽 $\delta\nu/\nu_0 = 10^{-6}$，则近似有 $T_k \approx 50$ K．它比观测到的星际 OH 脉泽约 10^{12} K 的亮温要小得多．

表 4.2 强脉泽的典型参数

类 型	$A(s^{-1})$	$\Gamma(s^{-1})$	F(Jy)
OH-恒星脉泽(1 612 MHz)	1.3×10^{-11}	0.03	2×10^{2}
H_2O-恒星脉泽(22.2 GHz)	1.2×10^{-9}	1	4×10^{3}
SiO-恒星脉泽(43.1 GHz)	3×10^{-6}	5	2×10^{3}
OH-星际脉泽(1 665 MHz)	7.2×10^{-11}	0.03	2×10^{2}
H_2O-星际脉泽(22.2 GHz)	1.9×10^{-9}	1	4×10^{4}
CH_3OH-星际脉泽(12.1 GHz)	7.9×10^{-9}	1	5×10^{2}

类 型	T_s [a] (K)	T_B (K)	θ_s/θ_d [b] (mas/″)	$\Delta\nu/\delta\nu$ [c] (km·s^{-1}/km·s^{-1})
OH-恒星脉泽(1 612 MHz)	1×10^{11}	10^{8}	$10^{3}/1$	1/30
H_2O-恒星脉泽(22.2 GHz)	3×10^{11}	10^{11}	$10/10^{-1}$	1/20
SiO-恒星脉泽(43.1 GHz)	2×10^{9}	10^{10}	$10/10^{-1}$	1/10
OH-星际脉泽(1 665 MHz)	2×10^{10}	10^{12}	10/1	0.1/5
H_2O-星际脉泽(22.2 GHz)	3×10^{11}	10^{14}	1/1	1/50
CH_3OH-星际脉泽(12.1 GHz)	5×10^{10}	$>10^{12}$	$<2/2$	1/5

a)指 $\Omega=10^{-2}$时的饱和亮温度.

b)指脉泽源斑与脉泽区的角尺度之比.

c)指脉泽特征的速度宽度与整个脉泽发射速度范围之比.

在饱和脉泽情况下,脉泽光子的体发射率由下式计算:

$$\Phi_m = B\,J\Delta n \approx B\,J\Delta P/(2BJ) = \Delta P/2 = \eta' P \tag{4.3.30}$$

式中 $P=P_u+P_l$,$\eta'=\Delta P/2P$. 由 $\Phi_m\propto\Delta P$ 可见,脉泽光子的体发射率正比于单位时间、单位体积中净抽运的光子数.或者说每一次

的抽运事件将以 $\eta'(=\eta/2)$ 的效率引起一个脉泽光子. 因此我们可将饱和脉泽看成是一个线性转换器. 一个完全饱和的脉泽是最有效的脉泽. 至于 η 的大小则由抽运机构决定.

在不饱和脉泽情况下,脉泽光子的体发射率为

$$\Phi_m = BJ\Delta n_0 \approx BJ\Delta P/\Gamma = (\Delta P/2)\cdot(J/J_s)$$

由于 $J < J_s$ 所以不饱和脉泽的光子发射率总是小于饱和脉泽的.

天体脉泽的光子发射率通常是很高的. 如 SiO 的恒星脉泽,其光子发射率大约是 $10^{43}\sim10^{45}\mathrm{s}^{-1}$,OH-恒星脉泽约 $10^{43}\mathrm{s}^{-1}$,OH-星际脉泽约 $10^{45}\sim10^{46}\mathrm{s}^{-1}$,$H_2O$-星际脉泽约 $10^{45}\sim10^{47}\mathrm{s}^{-1}$. 银河系最强的 W 49 中的 H_2O 脉泽,其光子发射率可高达 $10^{48}\mathrm{s}^{-1}$.

在饱和情况下,由于每一个净抽运光子都转换成一个脉泽光子,因此脉泽发射的总功率也很容易由净抽运速率求出(参看 4.3.30 式),即

$$L = h\nu\Delta P\ V = \eta h\nu\Gamma n_{ul}V \qquad (4.3.31)$$

式中 V 是脉泽体积. 以星际 OH 脉泽为例,银河系最强的 OH 脉泽功率大约是 2×10^{21} W. 而河外的 OH 超脉泽的光度竟可高达 10^{29} W,是太阳总光度的几千倍.

至此,所有上述的讨论都是在假设发射与吸收具有相同轮廓下进行的. 实际上谱线发射轮廓 φ_ν 和谱线吸收轮廓 ϕ_ν 在高脉泽强度时并不相同. 如果 $J_\nu > J_s$,脉泽首先在线心频率处降低上能级的布居. 此时可以在一个特定频率 ν 上写统计平衡方程. 假定在这特定的 Doppler(多普勒)频移上,上能级的布居 $n_{u\nu} = n_u\psi_{u\nu}$,下能级的布居 $n_{l\nu} = n_l\phi_{l\nu}$ 从某个(或某些)储能态向脉泽二能级的向下的辐射跃迁,也将有一个相应于储能态 Doppler 分布的频率轮廓 ϕ_ν,从而给出上下能级的抽运速率 $P_u\phi_{u\nu}$ 和 $P_l\phi_{l\nu}$ 将上述量代入统计平衡方程(4.3.9)和(4.3.10)式,用和以前同样的方法解这些方程最后可以得到形式相似的结果(详见参考资料[52]). 如:

$$\Delta n_\nu=\frac{\Delta n_0}{1+\frac{J_\nu}{J_s}}\phi_\nu$$

$$\Delta n_0=g_u\left[\frac{P_u}{g_u\Gamma_u}-\frac{P_l}{g_l\Gamma_l}\right]$$

$$J_s=\frac{1}{g_uB_{ul}\left[(g_l\Gamma_l)^{-1}+(g_u\Gamma_u)^{-1}\right]}$$

当 $g_u=g_l,\Gamma_u=\Gamma_l=\Gamma$ 时，上二式将分别还原为(4.3.13)和(4.3.12)式.

4.3.3　脉泽几何学及其观测特性　脉泽源的视尺度

同样种类的脉泽在不同的环境下常显示出不同的特性. 脉泽源区的运动学和几何学对脉泽源的观测特性有重要的影响. 如：我们知道谱线重叠在确定抽运效率时有明显的作用，然而不同的谱线可以引起重叠，这是由于在不同的区域因大的速度场梯度造成的不同的分子速度的缘故. 例如在HⅡ/OH区的 OH 主线强度和比率就和晚型星的情况有很大差别. 它很可能是由于相差很远的不同速度场所致. 类似的情况存在在于 H_2O 脉泽中. 在晚型星和恒星形成区中 H_2O 脉泽有同样的抽运机制，物理条件(温度、密度、丰度比)也相似，但是星际 H_2O 脉泽的强度要比晚型星中的强得多(见表 4.2)，这种差别多半是反映了相差很远的不同的几何学. 在恒星形成区，H_2O 脉泽产生于具有平板几何学的激波区，晚型星包层中的 H_2O 脉泽则处于球形的膨胀星风中.

本节主要介绍长柱形的和球形的脉泽以及在这两种模型下脉泽强度和视尺度的计算. 图 4.3 展示了几种简单的脉泽几何学和脉泽发射的波束(以角 θ 来表征，它反映了脉泽发射的方向性，). 图 4.3(a)是一个不饱和脉泽球，(b)是具有一个中心不饱和核的饱和脉泽球，(c)是一个圆柱状脉泽[9].

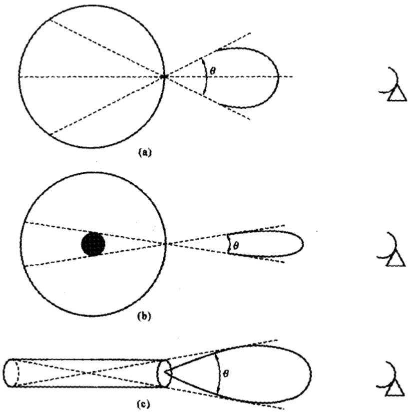


图 4.3 几种简单的脉泽几何学及其脉泽发射波束

前面提到，脉泽辐射的“集束效应”是脉泽特性的一个组成部分，也是理解脉泽几何学的重要方面. 脉泽辐射的高度方向性与脉泽辐射的强度随距离敏感变化有关. 在任何的几何学下，很难达到所有的射线长度一样，最强的脉泽只是发生在源中具有最长弦的方向[14]，从而造成脉泽源的视大小通常小于脉泽源的物理大小.

1、圆柱状脉泽

设有一个均匀抽运的长的、细管状或纤维状的脉泽. Ω 是脉泽源中任何一点上脉泽发射的波束立体角. 而通常考虑的都是脉泽源表面上的辐射波束角，用 Ω_m 表示，它是脉泽辐射的有效立体角. 脉泽源的辐射将集束在立体角 Ω_m 内，而且只有那些指向地球的

细管状或纤维状脉泽才会被观测到．柱形脉泽的时变可以用这些管状物或纤维状物的旋转或湍流运动来解释[3]．Ω_s则是观测者看到的脉泽源大小(视大小)．在管状脉泽情况下，当 $R \ll L$(管长)时，由于沿管芯和管壁的射线路径同长，所以其视大小近似等于源的实际大小，即等于管的横截面，这样

$$\Omega_s \approx \theta_s^2 = \pi R^2 / D^2 \tag{4.3.32}$$

式中 R 是管状脉泽的横截面半径，D 是观测者到源的距离．在谱线线心处观测到的流量 $F \approx I\Omega_s$，相应的脉泽亮温度

$$T_B = \lambda^2 I/2k = \lambda^2 F/(2k\Omega_s) \tag{4.3.33}$$

在 $R/L \ll 1$ 情况下，大多数的发射从管的端面出射，此时脉泽辐射的波束角(见图 4.3(c))

$$\Omega = \Omega_m \sim \pi (R/L)^2 \tag{4.3.34}$$

这样在不饱和极限下，当 $T_{ex0} \gg T_B(0)$，脉泽出射强度为

$$I \approx -\frac{2kT_{ex_0}}{\lambda^2} e^{\kappa_0 L} \tag{4.3.35}$$

而在完全饱和极限下，有

$$I = \kappa_0 I_s L \tag{4.3.36}$$

圆柱状脉泽的总光度可由下式估算：

$$L = I\Omega A \Delta\nu \tag{4.3.37}$$

式中 A 是圆柱状脉泽帽端的面积．对于完全饱和脉泽，将方程(4.3.12)、(4.3.19)、(4.3.36)和(4.3.32)代入辐射流量公式，得

$$F = I\Omega_s = h\nu \Delta P\, L^3/(2\Delta\nu D^2) \tag{4.3.38}$$

由上式得出一个重要的结果，即柱形饱和脉泽的观测流量不是随 L，而是随 L^3迅速增大的．利用柱形脉泽模型，可以通过加大长度来解释观测到的强的脉泽流量．因此常常被考虑作为一种抽运的方案．然而由于柱形脉泽的长度是无法直接观测到的，因此如何验证它是一个问题．此外，强柱形脉泽发射要求柱状物的轴线必须指向观测者，这样一种特殊要求或许只能对应一小部分脉泽云的情

况.脉泽云的准确形状不仅与云的几何形状有关,还与云中的速度分布有关[52].一个云中的系统速度意味着云的多种多样的运动成分,从而多普勒移动到谱线的不同频率上.脉泽不可能放大来自不同速度的其它部分的辐射.因此最终在某个速度上观测到的脉泽云形状应该是那些正在以同样速度运动的气体所围起来的形状.这一点读者可结合前面 3.4.2 节的分析来理解.

2. 球形脉泽

(1)不饱和球形脉泽

在不饱和球形脉泽情况下,由于不同的射线路径长度不同,脉泽输出强度也不同.其中过球心传播的脉泽最强,因为过球心的射线增益($=\kappa_0 d$,d 是球直径)最大.为了计算不饱和球形脉泽的波束立体角,假设脉泽强度下降到最大值的 1/2 时,其射线与径向的夹角为 ψ,则射线的路径长为 $d\cos\psi$.离中心的投射距离 $x = d^*/2$(详见图 4.4),显然,$d\cos\psi = (d^2 - 4x^2)^{1/2} = (d^2 - d^{*2})^{1/2}$.在不饱和且不考虑背景源的情况下,射线过球心时看到的脉泽强度为

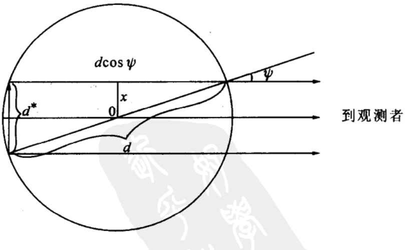


图 4.4 不饱和球形脉泽

$$I_{\max}=-\frac{2kT_{\mathrm{ex}_0}}{\lambda^2}\exp(\kappa_0 d) \tag{4.3.39}$$

沿投射距离为 $d^*/2$ 的射线看到的脉泽强度

$$I=-\frac{2kT_{\mathrm{ex0}}}{\lambda^2}\exp\left[(\kappa_0 d)\left(1-\frac{d^{*2}}{d^2}\right)^{1/2}\right]=\frac{I_{\max}}{2}$$

由于大的放大应该对应 d^* 较小时的射线，因此

$$\left(1-\frac{d^{*2}}{d^2}\right)^{1/2}\approx 1-\frac{1}{2}\left(\frac{d^*}{d}\right)^2,\qquad -\frac{\kappa_0 d}{2}\left(\frac{d^*}{d}\right)^2=-\ln 2$$

所以

$$\frac{d^*}{d}=\sqrt{\frac{2\ln 2}{\kappa_0 d}}\approx\frac{1}{\sqrt{\kappa_0 d}}=\frac{1}{\sqrt{\tau}}$$

由此导出不饱和球形脉泽的波束立体角

$$\Omega=\Omega_{\mathrm{m}}\approx(d^*/d)^2\approx 1/\kappa_0 d=1/\tau \tag{4.3.40}$$

上述结果说明，对于不饱和球形脉泽，其视大小(d^*)比物理大小(反转区实际大小 d)小 $\sqrt{\kappa_0 d}$倍. 由于球形脉泽增益 $\tau=\kappa d$，若脉泽增益大致为 10，则视大小比实际大小下降了 3.2 倍. 在不饱和脉泽下，在一个小的视尺度上获得了一个大的光度，这意味着脉泽源有一个高的表面亮度和亮温度. 由观测者看到的源立体角

$$\Omega=\Omega_{\mathrm{s}}=\frac{\pi\left(\frac{d^*}{2}\right)^2}{D^2}\approx\frac{\pi\left(\frac{d}{2}\frac{1}{\sqrt{\kappa_0 d}}\right)^2}{D^2}=\frac{R}{D^2\kappa_0} \tag{4.3.41}$$

R 是球的半径.

(2) 饱和球形脉泽

当脉泽源表面上的辐射强度超过 I_{s} 后，脉泽开始变得饱和. 利用(4.3.39)、(4.3.40)、(4.3.29)、(4.3.18)式和关系式 $I=2kT_{\mathrm{B}}/\lambda^2$可以导出下面的关系：

$$\frac{\mathrm{e}^{2\kappa_0 R_{\mathrm{s}}}}{2\kappa_0 R_{\mathrm{s}}}\approx\frac{P_{\mathrm{u}}-P_{\mathrm{l}}}{P_{\mathrm{l}}}\frac{\Gamma}{A}\approx\frac{2\Delta P}{P}\frac{\Gamma}{A}=\frac{2\Gamma\eta}{A}\quad(\text{当 }\eta\ll 1\text{ 时}) \tag{4.3.42}$$

推导中已经让 $R=R_s$，$T_B=T_s$. R_s 是开始饱和时脉泽球达到的半径，T_s 则是开始饱和时的脉泽强度. (4.3.42)式提供了球形脉泽开始饱和的一个条件[9]. 在大光学厚度情况下(有 $e^{2\kappa_0 R}\gg 2\kappa_0 R$)，由(4.3.42)式可以导出 R_s 的一个近似解：

$$R_s\approx\frac{1}{2\kappa_0}\ln\left[\frac{2\Gamma\eta}{A}\right] \tag{4.3.43}$$

但如果有一个饱和的壳层围绕其内部的不饱和核，由于向内的辐射(inward flowing radiation)将会对核的平均辐射强度产生影响，致使实际的 R_s 要小于上式的计算[52]. 总之，若脉泽的输入源是内部的自发发射，对于各向同性脉泽，脉泽将首先在球的外层边缘达到饱和，中间是一个不饱和的核. 随着饱和程度的不断增长，中间的不饱和核会变小，但 Litvak 证明[53]，即使在完全饱和的球形脉泽中仍保留着一个不饱和核. Goldreich 和 Keely 得到其半径 a 为[44]

$$a=1.3\left[\frac{P}{\Delta P}\frac{A}{\Gamma}\right]^{1/4}R \tag{4.3.44}$$

在部分饱和的球形脉泽中，指数放大发生在核里，故最强的射线是通过该核的射线. 因此完全饱和的脉泽是高度集束的，相应的波束角

$$\Omega\approx\frac{\pi a^2}{R} \tag{4.3.45}$$

观测者见到的脉泽云的核所张立体角

$$\Omega_s\approx\pi a^2/D^2 \tag{4.3.46}$$

注意到球形脉泽的 $\Omega_m=4\pi$，$F=L/(4\pi D^2\Delta\nu)$，则一个完全饱和的球形脉泽，其观测到的流量密度可用下式计算 (L 由(4.3.31)式表出)：

$$F\approx\frac{1}{3}h\nu\frac{\Delta P}{\Delta\nu}\frac{R^3}{D^2} \tag{4.3.47}$$

结合方程(4.3.13)、(4.3.14)、(4.3.44)、(4.3.46)和(4.3.47)可

将上式与观测量联系起来，即

$$D^{-1}\Delta\nu\theta_s^{-3}F\approx\frac{h\nu}{53}A^{-3/4}n_{ul}(\Gamma\eta)^{7/4} \qquad (4.3.48)$$

比较(4.3.38)和(4.3.47)式发现，管状脉泽和球形脉泽与脉泽源的尺度L或R有一样的三次方关系. 但管状脉泽是高度各向异性的发射($\Omega_m\sim R^2/L^2\ll 1$). 这样，它的总光度将比球形脉泽的小($\Omega_m/4\pi$)的因子. 这种各向异形可以缓和对一个特殊脉泽云的抽运要求. Elitzur 曾提出用非常长柱形的脉泽模型来解决抽运的困难. 然而，如果一个源是由大量随机取向的脉泽组成，那么仅仅一小部分($\Omega_m/4\pi$)可以被观测到. 对于一个纤维状脉泽的集合和球形脉泽，其整个光度的要求是一样的. 目前还很难决定哪一种脉泽模型更适于天体的情况.

4.3.4　脉泽辐射的谱线宽度

通常分子谱线的轮廓函数为高斯轮廓(详见第三章)，即

$$\phi(\nu)\propto\exp\left[-\left(\frac{\nu-\nu_0}{\Delta\nu}\right)^2\right] \qquad (4.3.49)$$

ν_0是线心频率，$\Delta\nu$是局部谱线宽度，$\Delta\nu$和速度频谱满足关系

$$\Delta\nu=\frac{\nu_0}{c}\Delta v,\quad \Delta v=(\Delta v_D{}^2+\Delta v_T{}^2)^{1/2} \qquad (4.3.50)$$

式中Δv_D为谱线多普勒宽度，$\Delta v_D=(2kT/m)^{1/2}$，Δv_T为湍动速度. 前面已证明，在不饱和脉泽时，有

$$I_\nu=I_0\exp(\kappa_\nu z),\quad \kappa_\nu=\kappa_0\phi(\nu)$$

在线心(ν_0)处，$\phi(\nu_0)=1$，$\kappa_\nu=\kappa_0$. 设在ν处$I_\nu=I_{\nu_0}/2$，则

$$I_{\nu_0}/I_\nu=2=\exp\{\kappa_0 z[(\phi(\nu_0)-\phi(\nu))]\}=\exp[\tau(1-\phi(\nu)]$$

$$\phi(\nu)=1-\tau^{-1}\ln 2$$

$$\ln\phi(\nu)=-(\nu-\nu_0)^2/\Delta\nu_D^2=\ln[1-\tau^{-1}\ln 2]$$

若$\tau\gg 1$，得$-\frac{(\nu-\nu_0)^2}{\Delta\nu_D^2}=-\tau^{-1}\ln 2$，则不饱和脉泽线宽为

$$\Delta\nu=\nu-\nu_0\approx\Delta\nu_D\sqrt{\ln 2}/\sqrt{\tau} \qquad (4.3.51)$$

$\Delta\nu_D\sqrt{\ln 2}=\Delta\nu_{th}$为谱线的热宽(半极大半宽度). 类似对脉泽视大小的讨论,如果脉泽增益 τ 为 10,则相应的不饱和脉泽的谱线宽度要比热宽度窄 3.2 倍. 然而当脉泽饱和后,脉泽的指数放大变成线性放大:

$$I_\nu=I_s\kappa z=I_s\kappa_0 z\phi(\nu)$$

所以谱线轮廓恢复到热动平衡下的多普勒轮廓. 饱和脉泽和不饱和脉泽线宽的不同特点可以定性解释如下:由于谱的线心处首先达到饱和,由指数放大转为线性放大. 而线翼强度小,仍是指数放大,这样就造成线心饱和时谱线变宽. 或者说在饱和时,用线性放大关系代替了指数放大关系. 这样在所有频率上均以同样的因子按 $\phi(\nu)$分布放大,谱线轮廓恢复到热的多普勒轮廓.

以上是标准理论结果. 然而,在实际的观测中,饱和的 OH 和 H_2O 脉泽常常仍具有窄的线宽. 特别是在星际 OH 脉泽(如 W3OH)情况下单个谱线宽度只有 0.1 km · s^{-1},等效温度仅 5 K[54],因此很有必要发展一种理论来解释这种强饱和脉泽中的窄谱线. Goldreich 和 Kwan (1974 年)提出,如果脉泽能级和其它能级间存在交叉弛豫的话,有可能解决这一困难[47].

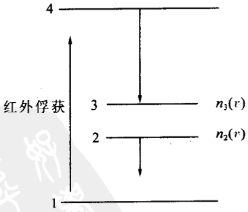


图 4.5　脉泽能级和其它能级间存在交叉弛豫时的示意图

Goldreich 和 Kwan 的方案可以阻止脉泽饱和时谱线的加宽. 如图 4.5 所示,设 2,3 为脉泽能级,1,4 为联系红外跃迁的能级. $n_2(v)$和 $n_3(v)$分别表示 2,3

能级上布居数随速度，也就是随频率的分布. 由于饱和时线心处下跳强度降低，因此 $n_2(v)$ 分布变宽. 此时若在 1,4 能级间的红外辐射俘获能将 $n_2(v)$ 线翼上的布居抽提到 $n_3(v)$ 布居的线心处，则可保持窄谱线的轮廓不变. 在物理上这种 1-4 间的跃迁影响到 2-3 间的跃迁叫做交叉弛豫. 如果交叉弛豫速率 γ 超过受激发射速率 R，这种谱线俘获将是重要的. 已知 $\gamma \approx kTA_p/h\nu_p$，式中 A_p 和 ν_p 是抽运跃迁的爱因斯坦系数和频率. 和 OH 脉泽不同，对于 H_2O 脉泽，$\gamma \approx 1\ s^{-1}$ 和 $R \approx 100\ s^{-1}$，所以看来这种机制是不重要的.

除了多普勒致宽外，脉泽线宽还受许多其它因素影响. Stark 效应引起的致宽对于 $T_B < 10^{17}$ K 情况是小的. 因此还没有关于它的证据. 磁场则通过 Alfven 湍动和 Zeeman 效应对谱线致宽. 我们在偏振一节中进行讨论.

4.3.5 脉泽辐射的偏振性质

和实验室脉泽中的情况一样，许多来自天体的脉泽显示出强的偏振特性. 有的脉泽辐射的偏振度甚至高达 100%. 特别是与 H Ⅱ 区成协的 OH 脉泽具有强的圆偏振和线偏振，更常见的则是圆偏振. 此外，除 $^2\Pi_{3/2}, J=3/2$ 的 OH 基态外，OH 分子的一些高激发态脉泽的偏振辐射也观测到了. OH 脉泽的偏振特性主要是通过谱线的 Zeeman 分裂而证认的. 图 4.6 展示的就是指向 W3 (OH) 致密 H Ⅱ 区时，各种不同跃迁的 OH 脉泽谱. 图中实线表示的 OH 脉泽的右旋圆偏振谱，虚线是左旋圆偏振谱[55]. 由观测到的 OH 脉泽谱的 Zeeman 分裂估计出 W3(OH) 中的磁场约 5×10^{-7} T.

除个别例子（如长周期变星 W Hya，U Ori 以及一些超巨星）外，恒星 OH 脉泽是非偏振的. 这是因为在离开中心星约 $10^{16}\sim10^{17}$ cm 的 OH 壳层中磁场太弱的缘故. 对于非顺磁分子，诸如：H_2O，SiO 和 CH_3OH 等的脉泽谱线，由于它们的 Zeeman 分裂太

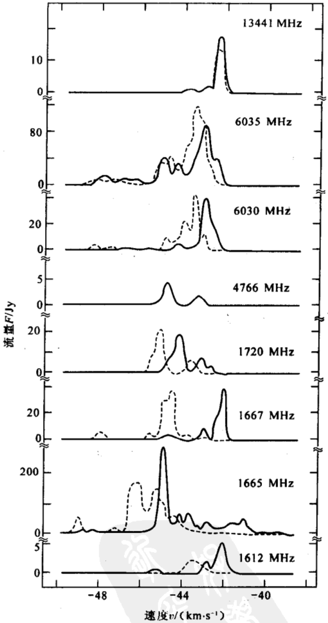


图 4.6 W3(OH)致密 H Ⅱ 区的不同跃迁的 OH 脉泽谱. 图中实线表示 OH 脉泽的右旋圆偏振谱，虚线是左旋圆偏振谱[55]

小，没有可探测的圆偏振. 观测表明，大约 25%的与 H Ⅱ 区成协的 H_2O 脉泽源显示线偏振的特征[56]. 在晚期演化星附近的拱星包层中观测到的 SiO 脉泽大多数是线偏振的[57,58]. 最典型的例子是将 SiO 脉泽的空间成图(VLBI)与偏振(单天线)的观测结合起来，从而得到了晚型星 R Cas 的 SiO 脉泽线偏振强度、方向以及速度的空间分布[59]. 这一类观测可以提供晚型星表面膨胀大气运动和磁场的详细信息.

在上述各种脉泽偏振的观测基础上，30 多年来发展了一系列有关的机制、偏振辐射理论和数值计算[60,45,46,61~65]. 星际和恒星脉泽偏振的观测与理论研究可以丰富我们对星际和晚期演化星附近磁场的知识. 对探讨磁场在恒星形成和演化过程中的作用有重要的意义.

1. Zeeman 分裂

由于谱线的 Zeeman 分裂是脉泽偏振的最可能的解释，我们这里先简单回顾一下谱线致宽的 Zeeman 效应. 能级的 Zeeman 分裂是由角动量 $\boldsymbol{F}$ 与外磁场 $\boldsymbol{B}$ 的相互作用 $\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{B}$ 引起的. 最后得各磁亚能级对原能级的偏离为[66]

$$\Delta W=h\Delta\nu=-\mu_n g_I\frac{M_F B}{2F(F+1)}[I(I+1)+F(F+1)-J(J+1)]-\mu_0 g_J\frac{M_F B}{2F(F+1)}[J(J+1)+F(F+1)-I(I+1)] \quad (4.3.52)$$

式中，μ_n 为核磁子，μ_0 为玻尔磁子，$\mu_n=\mu_0/1836$，$g_I\approx g_J\approx 1$. 各量子数的意义见第三章. 能级分裂根数为 $2F+1$. 对于 $^2\Pi_{3/2}$ 态，ΔW 中的第一项可忽略(因 $\mu_n\ll\mu_0$). 但对于 $^2\Pi_{1/2}$ 态，由于自旋磁矩和电子磁矩轨道分量的方向相反，因而大部分抵消了，使核自旋分量变成主要贡献. 结果，其分裂约为 $^2\Pi_{3/2}$ 态的 10^{-3} 倍.

Zeeman 分裂的量级正比于磁场，各磁亚能级由量子数 M_F 来区分. 当 $\Delta M_F=\pm 1$ 时是所谓的 σ 跃迁，并引起零场 $(B=0)$ 时频率两旁的谱线. $\Delta M_F=0$ 时则是所谓的 π 跃迁，谱线频率与零场时的

一样．在平行磁场观测时可以见到左旋和右旋圆偏振的 σ 分量，但通常见不到 π 分量．当垂直磁场观测时，π 分量是线偏振的（平行磁场），σ 分量也是线偏振的．谱线中 Zeeman 对的确认需要干涉仪观测的配合，严格讲只有完全来自同一区域的脉泽对才可成立．例如：在 W3（OH）的 OH-6 035 MHz 的脉泽中可看到 12 对的 Zeeman 分裂，其右旋圆偏振和左旋圆偏振的空间分离小于 3×10^{15} cm，得到的平均 Zeeman 对间距为 0.13″．扣除系统差，得平均间距为 0.08″（通常 OH 子源的最小分离是 0.1″），所以是可行的．用这种方法得到该区域的磁感应强度 B 约 5×10^{-7} T[7]．

2．脉泽偏振的基本理论

关于天体脉泽辐射的偏振理论，最早的也是最系统的工作是由 Goldreich 等人完成的[45,46]．虽然这一理论在某些地方尚不能完全解释观测到的事实，但它仍不失其重要地位，是我们理解观测到的脉泽偏振特征的一个起点．本节着重介绍由 Goldreich 等人的偏振理论所导出的主要结论．

Goldreich，Keeley 和 Kwan 等人发展了包括亚能级间弛豫作用在内的偏振理论．他们视脉泽云为等离子体，并在存在磁场的情况下，从分子密度矩阵的运动方程出发，导出了支配天体脉泽偏振辐射的转移方程．他们的研究表明，磁场和等离子体对脉泽的偏振性质有很大的影响．而偏振的特征则取决于以下几个参数间的相对大小．它们是：(1)脉泽能级的衰变速率 Γ；(2)受激发射速率 R；(3)Zeeman 分裂 $g\Omega$（g：朗德因子，Ω：拉摩尔频率）；(4)脉泽发射线宽 $\Delta\omega$．

对于不饱和脉泽（$R<\Gamma$），Goldreich 等人证明，除非 $g\Omega>\Delta\omega$，即相反两个方向的偏振辐射不重叠，否则脉泽辐射是不偏振的．而对于饱和脉泽（$R>\Gamma$），除非 $g\Omega>(R\Gamma)^{1/2}$，否则脉泽也是不偏振的．表 4.3 总结了沿 θ 方向传播的脉泽辐射的偏振特性与各种参数间的更细致的关系（θ 是视线方向与磁场的夹角，Q、I 为脉泽辐

射的 Stokes 参量).

表 4.3　在多种的 $g\Omega$ 范围内,沿 θ 方向传播的脉泽辐射的偏振特性

	不饱和脉泽($R<\Gamma$)	饱和脉泽($R>\Gamma$)
$g\Omega>\Delta\omega$	1. 如果 $\sin^2\theta<2/3$ σ 分量占支配地位 2. 如果 $\sin^2\theta>2/3$ π 分量占支配地位	放大 Zeeman 图
$\Delta\omega>g\Omega>R$	无偏振	如果 $\sin^2\theta>1/3$ $\frac{Q}{I}=\frac{3\sin^2\theta-2}{3\sin^2\theta}$ 如果 $\sin^2\theta<1/3$ $\frac{Q}{I}=-1$
$R>g\Omega>\Gamma$ $(g\Omega\sin\theta)^2>R\Gamma$		$\frac{Q}{I}=\frac{1}{3}$
$(g\Omega\sin\theta)^2<R\Gamma$	无偏振	无偏振

当一个脉泽能级和其它转动能级间存在红外谱线的俘获时,它们将在脉泽能级的简并子能级间产生布居数的迅速弛豫. 这种交叉弛豫,特别是当弛豫速率 $\gamma>R$(受激发射速率)时,会对脉泽辐射的偏振特性发生重要的影响. 快速的交叉驰豫将不利于观测到脉泽偏振. 表 4.4 总结了在 $\gamma>R$ 时脉泽辐射的偏振特性.

表 4.4　在 $\gamma>R$ 时脉泽辐射的偏振特性

	不饱和脉泽 $R<\Gamma$	饱和脉泽 $R>\Gamma$
$g\Omega>\Delta\omega$	1. 如果 $\sin^2\theta<2/3$ σ 分量占支配地位 2. 如果 $\sin^2\theta>2/3$ π 分量占支配地位	1. 如果 $\sin^2\theta<2/3$ σ 分量占支配地位 2. 如果 $\sin^2\theta>2/3$ π 分量占支配地位
$\Delta\omega>g\Omega>R$	无偏振	无偏振

续表

	不饱和脉泽 $R<\Gamma$	饱和脉泽 $R>\Gamma$
$R>g\Omega>\Gamma$ $(g\Omega\sin\theta)^2>R\Gamma$		无偏振
$(g\Omega\sin\theta)^2<R\Gamma$	无偏振	无偏振

由等离子体引起的法拉第旋转对脉泽发射的偏振也有影响. 当存在法拉第旋转时,如果单位增益长度上的法拉第旋转是大的,则 Zeeman 图的 π 分量是无偏振的,但 σ 分量是 100%圆偏振的. 其中,对于饱和脉泽,只有在整个饱和放大区法拉第旋转是大的时候,才会影响到脉泽的偏振. 至于 σ 分量和 π 分量的强度比,则和上面两表一样,取决于传波方向与磁场间的夹角 θ. 表 4.5 给出了法拉第效应大时的脉泽偏振特性.

表 4.5 在 $\gamma>R$ 和存在大法拉第旋转时的脉泽偏振特性

	不饱和脉泽 $R<\Gamma$	饱和脉泽 $R>\Gamma$
$g\Omega>\Delta\omega$	1. 如果 $\sin^2\theta<8/9$ σ 分量占支配地位 2. 如果 $\sin^2\theta>8/9$ π 分量占支配地位	1. 如果 $\sin^2\theta<8/9$ σ 分量占支配地位 2. 如果 $\sin^2\theta>8/9$ π 分量占支配地位
$\Delta\omega>g\Omega>R$	无偏振	无偏振

观测到的 H_2O 脉泽则较少偏振,而且只是线偏振. 根据表 4.3～4.5 的结果很容易理解它们. 由于微波 H_2O 跃迁的较高态和较低态的 g 值只大约为 8×10^{-4}.因此它的 Zeeman 分裂远小于 H_2O 脉泽的谱线宽度. 如果要产生一个与 H_2O 的典型线宽(约 50 kHz)相等的 Zeeman 分裂,所要求的磁感应强度高达 5×10^{-3} T. 这是无法满足的. 然而在一定的条件($R<g\Omega<\Delta\omega$)下稳定的线偏振仍可以发生. 但线偏振的增长将受到抑制,除非受激发射速率 R

超过交叉-弛豫速率 γ. 由于在 H_2O 脉泽情况下,γ 大约为1 s^{-1},常常是可忽略的. 对 SiO 脉泽有类似的情况. 但也有例外,目前在个别恒星形成区已经探测到 22 GHz 的 H_2O 脉泽有弱的圆偏振[67,68]. 部分圆偏振也在晚型星周围的 SiO 脉泽中观测到了[11],并且比 22 GHz 的 H_2O 脉泽强得多(其偏振度大约是 5%～10% 比 0.1%).

前面提到过,OH 脉泽的 g 因子都在 1 的量级,但 $\Pi_{1/2}, J=1/2, F=1-0$ 态除外,它们的 g 值要小得多,因此在这个跃迁中没有圆偏振观测到. 同时又由于 OH 脉泽的受激发射速率小于交叉-弛豫速率,因此在这种情况下,如果 $g\Omega<\Delta\omega$,则没有偏振可测到. 在许多与 HII 区成协的 OH 脉泽源中,100%圆偏振的存在支持了 $g\Omega>\Delta\omega, \gamma>R$ 和大的法拉第旋转是最频繁出现的情况. 事实上,OH 脉泽的 Zeeman 分裂 $g\Omega$ 在大约 10^{-7} T 的磁感应强度下,就可超过其线宽几个 kHz.

Goldreich 等人的偏振理论(简称 GKK)对揭示脉泽源的偏振性质及其与源物理条件的关系有重要意义,但该理论仍有一定的局限性. 首先该理论是对 $J=1-0$ 的脉择系统提出的. 1984 年 Western 和 Watson 将 GKK 的方法扩大到了 $J=2-1$ 脉泽[69],1991 年 Elitzur 又将其推广到适于任意角动量 J_u 和 J_l 的情况(这里,J_u 和 J_l 分别是上能态和下能态的转动量子数)[61]. 此外,在 GKK 理论中,几个量,如 $g\Omega, \Gamma, R$ 等必须满足一定的不等式,这样 GKK 的解就不能描述不满足这些强不等式的偏振. 正像 Nedoluha 和 Watson 所认为的,它是一个限制的或渐近性的辐射转移解[65]. 类似 GKK 理论中的一些方程已在一系列的研究中被数值积分[63,69]. 此外,有一些观测事实是 Goldreich 等人的偏振理论无法解释的. 如在有较强的圆偏振的源中,缺乏完整的 Zeeman 图,常常只有一种类型的圆偏振被观测到. 因此需要有补充的机制来解释两种圆偏振状态间的竞争. 一种可能的解释是由于源中存

在磁场和速度的梯度. 如果沿视线方向多普勒的位移和磁场的位移对一种偏振模式恰好匹配,那么有可能构成一个只放大一种偏振分量的滤波器. 这种只产生单个圆偏振特征的机制已由 Cook (1966 年)[60]和 Deguchi 及 Watson(1986 年)[62]提出. 前者要求磁感应强度随云的大尺度速度场相关地变化;后者则依赖于分离几个热谱线宽度的 Zeeman 三重线的重叠,这种谱线重叠在大多数传播方向上(与磁场垂直的方向除外)可以产生超过 90%的圆偏振. Nedoluha 和 Watson(1988 年)[70]还进一步详细地研究了这一机制. 在他们的计算中,假设抽运是各向同性的,并且忽略了起因于电子的法拉第旋转. Deguchi 及 Watson(1993 年)[71]重新调查了这两种效应(抽运和法拉第旋转)对最后输出的偏振的影响. 对于弱 Zeeman 分裂的 SiO 和 H_2O 脉泽($g\Omega \ll \Delta\omega$),Nedoluha 和 Watson(1993 年)评述了它们的线偏振和圆偏振特性. 指出当 $g\Omega \geqslant \Gamma$(分子态的衰变速率)时,偏振(以线偏振为主)将可产生. 新的圆偏振模型(即所谓强度依赖的、或"模拟的"Zeeman 效应模型)的结果表明,由拱星 SiO 脉泽的圆偏振推出的磁感应强度只是以前估计的 1/100 甚至更小[65].

§4.4 天体脉泽抽运理论

4.4.1 脉泽抽运的一般考虑

长期以来天体脉泽的抽运机制一直是脉泽研究领域中最富有挑战性的问题. 随着脉泽观测的深入,新的脉泽谱线以及河内和河外超强脉泽的不断发现,越来越多的各类脉泽的抽运问题提了出来. 其中特别是强的星际 OH、H_2O 和 CH_3OH 脉泽以及河外超、甚至巨脉泽的抽运都是远未圆满解决的问题. 由于许多有关脉泽源物理条件的信息都来自于脉泽抽运机制的研究,因此天体脉泽抽

运机制一直是天文学家极感兴趣的课题.

通常情况下系统粒子总是趋于布居基态,要产生脉泽就要有一种机制将粒子激发到较高的能态,以造成能级布居的反转. 已知任何一对脉泽能级总是与伴随它的一大批其它的能级通过辐射或碰撞相联系,因此,正如§4.2节讨论过的,一个抽运循环的建立将涉及大量分子能级的跃迁和物理环境的建立. 所谓脉泽抽运机制就是要找到使上、下能级粒子布居数反转的机构和所要求的极端非热动平衡的条件. 由于上、下能级粒子数差(见§4.3节)为

$$n_u - n_l = \frac{P_u - P_l}{\Gamma + 2R} = \frac{\Delta P}{\Gamma + 2BJ} = \Delta n \qquad (4.3.8)$$

在不饱和时

$$n_u - n_l \approx (P_u - P_l)/\Gamma = \frac{\Delta P}{\Gamma} \qquad (4.3.13)$$

因此造成上、下能级粒子数反转的方法无非两种:

(1)使 $P_u > P_l$

提高上能级的抽运速率的方法主要有辐射抽运和碰撞抽运两种. 究竟哪一种方法占支配地位取决于抽运能量的主要来源是辐射还是碰撞. 其它的方法还有化学反应和辐射转移效应. 如有人发现由 H_2O 分子离解产生的 OH 分子,将优先布居 OH 的 Λ 双重能级的上能级. 此结果可能成为 OH 脉泽的激发机制之一. 这是与化学反应有关一种抽运机制[72,73]. 而在跃迁过程中引入逃逸概率则正是考虑辐射转移效应的结果.

(2)使 $\Gamma_l > \Gamma_u$

无论是上能级还是下能级,脉泽能级的衰变主要是通过向下的自发跃迁或碰撞跃迁进行的.

通常的方法首先将系统激发到较高能级上,然后由于自发衰变级联地向下跃迁达到一些较低的能级,从而造成某一对或某几对能级间粒子数的反转.

实际的脉泽布居数的反转可以通过解多能级的统计平衡方程，在同时考虑辐射和碰撞抽运时求得. 如果认为在所考虑的问题中辐射抽运为主，可在统计平衡方程中略去碰撞项. 在实际问题中决定哪些能级应包括到抽运框架里是有一定困难的. 原则上应该包括足够多的能级直到多加的能级不再与脉泽发射有关. 至少那些能量在基态以上约 kT 的能级应包含在内，然而有时它会显得不足，有时又不必要这么多. 总之这里有一定的不确定性[12].

由第三章的讨论可知，逃逸概率的引入使联立求解辐射转移和统计平衡方程的问题蜕化为解一个方程，即统计平衡方程(或定态下的速率方程). 存在碰撞和外部辐射时，对于 i 能级的速率方程的完整形式如下(设 i 为脉泽的上能级，j 为脉泽下能级，当 j 作为取和参量时，它表示除了 i 能级外的其它能级)：

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t}=-\sum_{j<i}\{&A_{ij}\beta_{ij}[n_i+W\tilde{I}(\nu_{ij})(n_i-n_j)]+\\&C_{ij}[n_i-n_j\exp(-h\nu_{ij}/kT)]\}+\\\sum_{j>i}\frac{g_j}{g_i}\{&A_{ji}\beta_{ji}[n_j+W\tilde{I}(\nu_{ji})(n_j-n_i)]+\\&C_{ji}[n_j-n_i\exp(-h\nu_{ji}/kT)]\}\end{aligned}\qquad(4.4.1)$$

$$\tilde{I}(\nu_{ij})\equiv I_r(\nu_{ij})C^2/2h\nu_{ij}^3=[\exp(h\nu_{ij}/kT_r)-1]^{-1}$$

式中 W 是由(3.3.25)式表示的辐射场稀释因子，通常 $W=\mathrm{d}\Omega/4\pi$，$\mathrm{d}\Omega$ 是在脉泽源处看到的外部辐射源的立体角；I_r 是用普朗克函数描述的外部辐射场强度；T_r 是等效黑体温度. 同理可以有能级 j 的速率方程，并有 $\sum_{i=1}^{L}g_in_i=N_m$ 是分子的总数密度. 统计平衡时，$\mathrm{d}n_i/\mathrm{d}t=0$，$\mathrm{d}n_j/\mathrm{d}t=0$. 单位体积的抽运速率 P_i 和衰变速率 Γ_i 也可以直接由进入和离开 i 能级的物理过程决定，即

$$P_i=\sum_{E_j>E_i}n_j[A_{ji}\beta_{ji}(1+W\tilde{I}(\nu_{ji})+C_{ji}]+\sum_{E_j<E_i}n_j\left[\left(\frac{g_i}{g_j}\right)A_{ij}\beta_{ij}W\tilde{I}(\nu_{ij})+C_{ji}\right]\qquad(4.4.2)$$

$$\Gamma_i=\sum_{E_j<E_i}[A_{ij}\beta_{ij}(1+W\widetilde{I}(\nu_{ij})+C_{ij}]+\sum_{E_j>E_i}\left[\left(\frac{g_j}{g_i}\right)A_{ji}\beta_{ji}W\widetilde{I}(\nu_{ji})+C_{ij}\right] \tag{4.4.3}$$

同理也可对脉泽下能级写出它的 P 和 Γ. 有了脉泽上、下能级的抽运速率，利用(4.3.30)式可求出脉泽光子的体发射率. 由上两式看，无论是抽运速率还是衰变速率均与脉泽能级的布居数不直接有关. 然而一旦连接脉泽能级和其它能级的跃迁变得光学厚时，相应的逃逸概率 β_{ji}将与脉泽能级本身的布居 n_i 有关. 在速率方程中包括进脉泽的相互作用后，由于方程的高度非线性将使数值计算变得复杂(参看第三章). 还有，脉泽的速率方程(4.4.1)在形式上与热的、非脉泽的方程一样. 但脉泽放大时，光学厚度变为负值，逃逸概率和 τ 的关系也变得与非脉泽时很不一样. 对于脉泽，当 $|\tau|$ 很小时(对应弱源)，$\beta\approx1$. 但当 $|\tau|$ 很大时(对应强源)，$\beta\propto e^{\tau}$ 将随 τ 指数地增长. 此外，由于脉泽的高度集束性，我们在计算脉泽逃逸概率时必须考虑辐射的波束立体角 Ω_ν. 如对于不饱和脉泽有 $\beta=\frac{\Omega_\nu}{4\pi}\frac{\exp\tau_\nu(\mu_0)-1}{\tau_\nu(\mu_0)}$ (μ_0 是最大路径方向的方向余弦). 在计算脉泽发射的亮温度时，也要知道源的波束角. 然而 Ω_ν 的确定无论在观测上还是理论上都还有一定的难度.

最后要提到的是，对于一个特定脉泽的任何抽运框架必须满足以下两个基本要求[12]：(1)提出的抽运方案必须能产生导致脉泽跃迁的布居反转. 究竟是哪一种抽运取决于使脉泽分子从基态激发至高激发态的外部过程的性质. 如果是碰撞激发则是碰撞抽运，但不排斥分子可以通过级联的辐射衰变去布居脉泽的上能级；反之如果是辐射激发则为辐射抽运. (2)提出的抽运方案必须能够产生观测的脉泽光度. 如果在一个饱和源中脉泽的光子光度是 $\mathscr{L}_m(s^{-1})$，单位时间总抽运事件数是 $\mathscr{L}_p(s^{-1})$，则 $\mathscr{L}_m=\eta\mathscr{L}_p$. 因为 $\eta<1$，这就要求对于任何潜在的抽运，单位时间抽运事件的数目必

须超过单位时间发射的脉泽光子数．关于这方面的详细讨论和定量计算见§4.4.4节．

4.4.2 辐射抽运

如前所述，当脉泽分子基态的激发是由外部源的辐射所支配则称为辐射抽运．该外部源可以是脉泽区附近或中心的年轻星、电离氢(HII)区或者晚型的红巨星，也可以是与脉泽气体共存一处的尘埃粒子．处理辐射抽运的最简单方法可以略去(4.4.1)式中的碰撞项．这样，在定态情况下，(4.4.1)式中的每一项将趋于下式所表示的关系：

$$\frac{n_i}{n_j}=\frac{W\,\tilde{I}(\nu_{ij})}{1+W\,\tilde{I}(\nu_{ij})}=\frac{W}{\exp(h\nu_{ij}/kT_r)-(1-W)} \quad (4.4.4)$$

这里 $E_i>E_j$．(4.4.4)式适于所有 i-j 对的能级布居．当外部辐射场的等效黑体温度 T_r 与 i,j 无关，且 $W=1$ 时，该辐射场是普朗克型的，能级布居在 T_r 上热化．此时布居反转不可能．因此辐射抽运的第一个限制是辐射场不可遵循黑体律．但如果 $W<1$，是一个稀化的黑体辐射场时，则原则上有可能产生偏离玻耳兹曼的分布．但是，在纯辐射抽运下，它不适于仅一个其它能级的情况．当 $W=0$，且 C_{ij} 也为零，在达到平衡时，所有粒子将级联跳回基态，布居也不可能反转．

现在分析辐射抽运的另一个限制，即每一个脉泽能级如果只和一个其它能级交换布居，那么脉泽能级的布居反转是不可能的．为此可以设想一个三能级模型．能量最低的两个能级为脉泽能级(记作1和2)．惟一的一个较高能级通过辐射与脉泽能级联系．由(4.4.4)先写出 n_3/n_2 和 n_3/n_1 的表达式，随即可得到：

$$\frac{n_2}{n_1}=\frac{\exp(h\nu_{32}/kT_{b32})-(1-W)}{\exp(h\nu_{31}/kT_{b31})-(1-W)} \quad (4.4.5)$$

由于 $\nu_{32}(=\nu_{31}-\nu_{21})$ 总是小于 ν_{31}，故这种情况不可能导致布居反

转. 这样,一个辐射抽运的循环总是要涉及较多的能级.

4.4.3　碰撞抽运

当来自基态的激发是由碰撞支配时被称作碰撞抽运. 和辐射抽运不同,在处理碰撞抽运时,我们不能简单地在方程(4.4.1)中略去辐射项. 因为如果所有的跃迁都是碰撞支配的话,必将导致能级的热化,脉泽辐射消失. 欲使系统偏离热平衡就要求辐射衰变可以对抗碰撞去激发,至少对抽运循环中的某些跃迁应该是这样. 为了更清楚地看到碰撞效应引入后对脉泽能级布居的影响以及限制,我们从方程(4.3.9)和(4.3.10)出发. 引入碰撞效应后定态脉泽系统的能级布居方程(4.3.9)和(4.3.10)分别写成:

$$P_i-(n_i-n_j)B_{ij}J-n_i\Gamma-C_{ij}\left[n_i-n_j\exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)\right]=0 \quad (4.4.6)$$

$$P_j+(n_i-n_j)B_{ij}J-n_j\Gamma+C_{ij}\left[n_i-n_j\exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)\right]=0 \quad (4.4.7)$$

辐射衰变可以包含在衰变速率 Γ 中. 上二式相减得

$$\Delta n=n_i-n_j=\frac{\Delta P-nC_{ij}[1-\exp(-\Delta E/kT)]}{\Gamma+C_{ij}[1+\exp(-\Delta E/kT]+2B_{ij}J},n = n_i+n_j \quad (4.4.8)$$

如将此式写成标准形式 $\Delta n=\frac{\Delta n_0}{1+J/J_s}$,并假定 $\Delta E\ll kT$,则 Δn_0 和 J_s 分别为:

$$\Delta n_0=\frac{\Delta P}{\Gamma}\frac{1-\eta^{-1}(C_{21}/\Gamma)(\Delta E/kT)}{1+2C_{ij}/\Gamma},J_s=\frac{\Gamma}{2B_{ij}}(1+2C_{ij}/\Gamma) \quad (4.4.9)$$

(4.4.8)式表明,碰撞抽运时碰撞的影响不仅表现在$\frac{\Delta P}{\Gamma}$上,还表现在欲使 $\Delta n_0>0$,必须

$$C_{ij}<\eta\Gamma kT/\Delta E \quad (4.4.10)$$

它说明,为了防止布居的热化,进入脉泽跃迁的碰撞概率 C_{ij}必须

受到限制.

在考虑碰撞效应后，求解多能级统计平衡方程(4.4.1)的关键是找到各个能级间的碰撞系数 C_{ij}和 C_{ji}. 已知碰撞跃迁概率 $C_{ij}=n'\gamma_{ij}$(参看(3.2.3)式)，n'是与我们所研究分子发生碰撞的主要粒子的数密度. 在大多数分子云和拱星包层情况下，氢分子是最主要的成分，所以通常我们都是讨论某种分子与氢分子的碰撞跃迁. 但在某些特定环境中分子与原子氢(H)、氦(He)甚至电子的碰撞会显得重要起来. 如讨论 HII 区附近高强度的 H_2O 和 OH 脉泽抽运时，H 原子、电子对它们的碰撞激发就是一个不可缺少的组成部分. 上式中的 $\gamma_{ij}(\mathrm{cm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1})$称作碰撞跃迁速率系数. 两个粒子的碰撞相互作用取决于它们之间的相互作用势和相对速度 v(当然，v 又和温度有关). 通常定义 $\gamma_{ij}=v\cdot\sigma_{ij}$. σ_{ij}具有面积的量纲，在物理上表示两个粒子之间的有效碰撞截面. σ_{ij}或者 γ_{ij}的确定是分子天体物理学研究中最困难的问题之一. 它的基本困难是天体物理中要求得到的 σ_{ij}是在特定能级间的碰撞横截面，而实验室中能够测量的往往只是覆盖许多跃迁的平均. 所以必须借助理论的计算.

对于由电子碰撞引起的分子激发，如果温度足够高，有 $kT\gg\Delta E_{ij}$成立，则对于 i-j 的碰撞去激发速率系数有一个简单的公式[12]，即

$$\gamma_{ij}=3.57\times10^{-6}\mu_{ij}^2T^{-1/2}\ln[2.59\mu^{-1}(kT/\Delta E_{ij})]\mathrm{cm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1} \tag{4.4.11}$$

式中 μ 是分子的电偶极矩，μ_{ij}是跃迁的偶极矩阵元，均以 Debye 为单位. 对于允许的跃迁，当 $kT/\Delta E$ 为 10^3 量级时，典型的 γ_{ij}约为 $10^{-6}\mathrm{cm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$.

处理由 H_2 分子碰撞引起的激发比电子的要困难. 研究表明，这种中性粒子间碰撞的速率系数有一个随 Δv 和 ΔJ 减小的趋势(Δv 和 ΔJ 分别对应振动量子数和转动量子数的增加). 不过这种减小是很慢的. 最大转动横截面的量级粗略等于分子的几何截面.

和 H_2 碰撞的典型转动速率系数服从下式[12]：

$$\gamma_{ij} \approx (10^{-11} \sim 10^{-12}) \cdot T^{1/2} \text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1} \qquad (4.4.12)$$

振动碰撞速率系数大约是它的 10^{-3}倍. 因此当脉泽区电子的相对丰度大约小于 10^{-5}时，中性粒子间的碰撞将是主要的.

天文分子碰撞速率的计算以 Sheldom Green 和他的同事们的工作最为突出. 他们采用理论方法发表了一系列分子碰撞截面的计算结果.

4.4.4　最小抽运功率条件

一个脉泽运转的内部保证是脉泽的抽运机构，外部保证是抽运能源(如§4.2 节所分析，至少需要两个不同温度的储能器，一个热源，一个冷源)，合适的环境参数，如气体密度、电子密度和运动温度等.

在设计脉泽抽运机构时，对某种脉泽抽运机制能否提供最低限度的抽运功率是很必要的. 前面我们已经论证过，对一个饱和脉泽每一次抽运事件，即使在 100%的转换效率下，最多也只能提供一个脉泽光子(详见(4.3.30)式). 这样根据观测到的脉泽强度可以导出所要求的最小抽运功率条件.

对于截面为 σ，长度为 l 的柱形饱和脉泽，在线心处，最大脉泽强度为

$$I \leqslant \frac{n_l \Delta P \sigma l h \nu_{ij}}{2\Omega\sigma\Delta\nu_{ij}} = \frac{n_l \Delta P l^3 h\nu_{ij}}{2\sigma\Delta\nu_{ij}} \quad (\Omega = \sigma/l^2) \qquad (4.4.13)$$

式中 ΔP 是上、下能级抽运速率差. 由于脉泽流量为

$$S_m = I\Omega_s = I\ (\sigma/D^2) \qquad (4.4.14)$$

(Ω_s 为观测者看到的脉泽源的立体角)，因此要得到观测的脉泽流量，必须要有足够的抽运功率($n_l \Delta P h\nu_{ij}$)，其最低限(这里用 $n_l \Delta P$ 代表)由下式表示：

$$n_l \Delta P \geqslant \frac{2\Delta\nu_{ij} D^2 S_m}{l^3 h \nu_{ij}} \qquad (4.4.15)$$

$$\left(\frac{n_l}{\mathrm{cm}^{-3}}\right)\left(\frac{\Delta P}{\mathrm{s}^{-1}}\right)\geqslant 10\left(\frac{l}{\mathrm{AU}}\right)^{-3}\left(\frac{D}{\mathrm{kpc}}\right)^{2}\left(\frac{S_{\mathrm{m}}}{\mathrm{Jy}}\right)\left(\frac{\Delta\nu_{ij}/\nu_{ij}}{10^{-6}}\right) \qquad (4.4.16)$$

(4.4.16)式即为最小抽运功率条件.

以 H_2O 脉泽源为例,由观测得到的几个著名恒星形成区的最小抽运功率条件如下:

W49($\geqslant 10^3\ \mathrm{cm}^{-3}\cdot\ \mathrm{s}^{-1}$), W51M($10^4\ \mathrm{cm}^{-3}\cdot \mathrm{s}^{-1}$量级), W51N($10^3\ \mathrm{cm}^{-3}\cdot\ \mathrm{s}^{-1}$量级),OMC1($10^3\ \mathrm{cm}^{-3}\cdot\ \mathrm{s}^{-1}$量级),W3-OH($10^{2\sim3}\ \mathrm{cm}^{-3}\cdot\ \mathrm{s}^{-1}$量级).

Strelnitskij 根据抽运过程中两种储能器(吸热和放热,激发和衰变)的性质和抽运循环中涉及的跃迁,将抽运机制分成许多类型. 进一步研究表明[74],对于振动能级上的辐射抽运,接着辐射退激发的模型(如 Litvak 的近红外抽运模型[75],记作 RRv),其可提供的最小抽运功率: $n_l\Delta P\leqslant 10^2\ \mathrm{cm}^{-3}\cdot\ \mathrm{s}^{-1}$, 而对于转动能级上的碰撞抽运,接着碰撞去激发的模型(记作 CCr),只要 n_e/n_H很小,例如为 3×10^{-6}, n_H 为 $10^{11}\ \mathrm{cm}^{-3}$量级, n_{H_2O}为 $10^{-3}\,n_H$量级,则其可提供的最小抽运功率: $n_l\Delta P$ 约为 $6\times10^3\ \mathrm{cm}^{-3}\cdot\ \mathrm{s}^{-1}$. 这样看来,CCr 模型有可能满足 H_2O 脉泽的抽运要求. 但在参数上有一定的困难. 其它如 Goldreich 和 Kwan 等人的振动能级上热尘埃(如激波前)的辐射抽运与冷气体的碰撞去激发模型(RCv)[76]以及其它 CRr,CRv 等抽运模型在解释 H_2O 脉泽的强发射上都存在程度不同的困难.

对抽运源最小抽运功率的要求也就是对抽运源光度的要求. 现在我们再从另一个角度来讨论这个问题. 如果 D 是抽运源到观测者的距离,则每秒钟进入脉泽云的抽运光子数 N_p 可由下式决定[8],即

$$N_{\mathrm{p}}=S_{\mathrm{p}}\,4\pi D^2\,\frac{\Delta\nu_{\mathrm{p}}}{h\nu_{\mathrm{p}}}\frac{\Omega_{\mathrm{m}}}{4\pi} \qquad (4.4.17)$$

式中 S_p 是观测者测量到的抽运源的流量,$\Delta\nu_p$是抽运跃迁的谱线

宽度，Ω_m是由抽运源看到的脉泽云的立体角，ν_p是抽运频率. 同理，每秒钟脉泽云发射的脉泽光子数由下式计算：

$$N_m = S_m 4\pi D^2 \frac{\Delta\nu_m \Omega_0}{h\nu_m 4\pi} \quad (4.4.18)$$

式中下标 m 代表与脉泽源有关的量. Ω_0 是脉泽辐射的立体角，对球形脉泽 $\Omega_0 = 4\pi$，对柱形脉泽 $\Omega_0 = \Omega$. 根据每一个脉泽光子的发射至少需要提供一个抽运光子，因此 $N_p > N_m$，从而得

$$S_p > S_m \frac{\Omega_0}{\Omega_m} \frac{\Delta\nu_m}{\nu_m} \frac{\nu_p}{\Delta\nu_p} \quad (4.4.19)$$

假定抽运源具有黑体能谱，则

$$S_p = B_{\nu_p}(T_p)\Omega_p \quad (4.4.20)$$

式中 Ω_p是在地球上看到的抽运源的立体角. 抽运源的光度可由下式计算：

$$L_p = 4\sigma T_p^4 \Omega_p D^2 \quad (4.4.21)$$

将 (4.4.20)和(4.4.21)式代入(4.4.19)式得

$$L_p > S_m 4\pi D^2 \frac{\sigma T_p^4}{B_{\nu_p}(T_p)} \frac{\Omega_0}{\Omega_m} \frac{\Delta\nu_m}{\nu_m} \frac{\nu_p}{\Delta\nu_p} \quad (4.4.22)$$

为了对 L_p 有一个最低估计，发现右方

$$\frac{T_p^4}{B_{\nu_p}(T_p)} \propto T_p^4[\exp(h\nu_p/kT_p) - 1]$$

在 $h\nu/kT \approx 3.9$ 时，上式有最小值. 将此值代入(4.4.22)式，得最低要求的抽运源光度应满足

$$L_p > 20.5\nu_p S_m D^2 \frac{\Omega_0}{\Omega_m} \frac{\Delta\nu_m}{\nu_m} \frac{\nu_p}{\Delta\nu_p} \quad (4.4.23)$$

以 W49-H_2O (在该脉泽云中嵌埋有一个 O-型星)为例，若我们假设 $S_m = 10^{-26}$ W · cm^{-2} · Hz^{-1}(10^4 Jy)，$\lambda_p = 0.1\ \mu$m(抽运波长)，$D = 3\times10^{22}$ cm($\approx$10 kpc). 假设 $\Delta\nu_m \approx \Delta\nu_p$，$\Omega_0 \approx \Omega_m$，由(4.4.15)式得抽运源(如中心 O-型星)的光度 $L_p > 10^9 L_\odot$. 这个光度高出 O-型星可以产生光度的 4 个量级. 除非在 W49 中的脉泽

是高度集束的(即 Ω_0 很小),并且抽运源在脉泽云内部,也就是 $\Omega_m=4\pi$,否则紫外(UV)抽运是不可能的. 已知 W49 中,$\Phi_m(H_2O)=10^{48}$光子/秒. 通常对于光子发射率大于 10^{44}光子/秒的脉泽源是不可能用连续源的 UV 光子抽运的. 由于(4.4.23)式中的右方和 ν_p 成正比,ν_p 减小对抽运光度要求降低,因此红外抽运的可能性较大. 但在恒星形成区,O-B 星在红外部分的光度较小,抽运也是困难的,除非 H_2O 也是高度集束的.

由上分析,对于星际强脉泽,辐射抽运的可能性较小. 目前的看法大多集中于碰撞抽运. 对于 H_2O 脉泽源,由于源区的密度较高,有利于碰撞抽运. 那么为什么碰撞较多时不至于热布居呢?这是因为通过碰撞布居的高能态由于自发衰变到较高能态的概率还是比到低能态的概率大. 此时只要自发辐射的光子能逸出云外,就可维持非热布居. (当然,为保持非热布居,密度也不能太高,对于 H_2O 和 CH_3OH 脉泽,氢分子密度不得大于 $10^{11}\ cm^{-3}$,对于 OH 脉泽则不得大于 $10^9 cm^{-3}$.)

4.4.5 脉泽抽运中的谱线重叠

在多能级的辐射转移和统计平衡计算中,常遇到许多不同的谱线处于接近的频率. 如在 OH 情况中,一些谱线的频差在 1 ~ 10 MHz 范围内. 谱线的热宽度约 1 MHz,而由速度引起的频移常常大于 10 MHz. 这样,当存在大的速度场梯度时,有必要考虑因谱线的多普勒频移所引起的谱线重叠效应.

谱线重叠通常包含发射线重叠和吸收线重叠两个方面. 发射线重叠指在某个谱线'p'中产生的辐射可以被分子的另一个不同的跃迁'm'所吸收. 如果某一条谱线可以重叠好几条另外的谱线就称作"多重重叠". 吸收线重叠指连续谱的背景辐射被某一条谱线所吸收.

谱线重叠是非常普见的现象. 如在 OH 分子的 $^2\Pi_{3/2}$,$J=3/2$

— 13/2 和$^2\Pi_{1/2}$，$J=1/2$ — 11/2 的 48 个 Λ-双重性的超精细能级中包含了 207 个辐射跃迁，1042 个碰撞跃迁，其中涉及到谱线重叠的跃迁就有 140 个．随着所计算的能级数的增加谱线重叠数也急剧增加[64]．谱线重叠对脉泽的抽运有重要的影响．谱线重叠的效应主要表现在改变了所涉及谱线的源函数．在没有谱线重叠时，我们可用(4.3.3)式来计算辐射的强度，即当分子从 i 态跃迁到 j 态时，辐射强度

$$I_{ik}=I_{BG}\beta_{ik}+S_{ik}(1-\beta_{ik}) \tag{4.4.24}$$

考虑谱线重叠后上式变为

$$I_{ik}=I_{BG}\beta_{ik}+(1-\beta_{ik})\frac{2h\nu^3}{c^2}\chi_{ik} \tag{4.4.25}$$

$$\chi_{ik}=\left[\frac{n_iA_{ik}+\text{谱线重叠项}}{A_{ik}\left(n_k\dfrac{g_i}{g_k}-n_i\right)+\text{谱线重叠项}}\right] \tag{4.4.26}$$

此时统计平衡方程可写成

$$\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t}=0=[C_{ki}n_k-C_{ik}n_i]-\beta_{ik}A_{ik}n_i+\beta_{ik}I_{BG}[B_{ki}n_k-B_{ik}n_i]$$

$$+[1-\beta_{ik}]\frac{2h\nu^3}{c^2}\chi_{ik}[B_{ki}n_k-B_{ik}n_i] \tag{4.4.27}$$

如果谱线重叠非常小，上面的方程将趋于下式

$$\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t}=0=[C_{ki}n_k-C_{ik}n_i]-\beta_{ik}A_{ik}n_i+\beta_{ik}I_{BG}[B_{ki}n_k-B_{ik}n_i] \tag{4.4.28}$$

这恰好恢复到方程(4.4.1)所描述的情况．

至此我们已系统介绍了天体脉泽辐射和抽运理论的最基础的知识．有关各种天体脉泽辐射和抽运理论的研究进展，我们将在本书下册中作进一步的介绍和讨论，它将使我们在理论上能更完整地理解碰撞、辐射以及谱线重叠等在脉泽辐射和抽运过程中的作用．

参 考 资 料

[1] Litvak M M. Ann Rev Astron Astrophys, 1974, 12: 97.

[2] P Goldreich. In: Balian R, Encrenaz P, Lequeux J, ed. Atomic and Molecular Physics and the Interstellar matter, Les Houches Sess. XXVI. North Holland: Amsterdam, 1975. 409.

[3] Moran J M. In: Avrett E H, ed. Frontiers of Astrophysics. Cambridge: Harvard University, 1976. 385.

[4] Cook A H. Celedtial Masers. Cambridge: Cambridge University Press, 1977 (中译本：天体微波激射．周震浦，吴洪敖译．北京：科学出版社，1984).

[5] Reid M J, Moran J M. Ann Rev A&A, 1981, 19: 231.

[6] Elitzur M. Rev Mod Phys, 1982, 54: 1 225.

[7] Genzel R. In: Haschik A D, ed. Masers, Molecules and Mass Outflows in Star Forming Region. Westford: Haystack Observatory, 1986. 233.

[8] Reid M J, Moran J M. In Verschuur G L, Kellermann K I, ed. Galactic and Extragalactic Radio Astrnomy. New York: Springer-Verlag, 1988. 255.

[9] Moran J M. In: Hartquist T W, ed. Molecular Astrophysics; a Volume honouring Alexander Dalgarno. Cambridge: Cambridge University Press, 1990. 397.

[10] Kylafis N D. In: Lada C J, Kylafis N D, ed. The Physics of Star Formation and Early Stellar Evolution, Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1991. 269.

[11] Elitzur M. Ann Rev A&A, 1992, 30: 75.

[12] Elitzur M. Astrophysical Masers. Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1992.

[13] Clegg W C, Nedoluha G E. (eds.) Astrophysical Masers. Berlin:

Springer, 1993.
[14] Elitzur M. In: Wall W F, Carraminana A, Carrasco L, ed. Millimeter-Wave Astronomy: Molecular Chemistry & Physics in Space, Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1999. 115.
[15] Weaver H, et al. Nature, 1965, 208: 29.
[16] Moran J M, et al. ApJ, 1968, 152: L97.
[17] Wilson W J, Barrett A H. A&A, 1972, 17: 385.
[18] Cheung A C, Rank D M, Townes C H, et al. Nature, 1969, 221: 626.
[19] Burke B F, Papa D C, Papadopoulos G D, et al. ApJ, 1970, 160: L63.
[20] Snyder L E, Buhl D. ApJ, 1974, 189: L31.
[21] Hasegawa T, Morita K, Okumura S, et al. In: Haschik A D, ed. Masers, Molecules and Mass Outflows in Star Forming Regions. Westford: Haystack Observatory, 1986. 275.
[22] Ball J A, Gottlieb C A, Lilley A E, et al. ApJ, 1970. 162: L203.
[23] Barrett A H, Schwartz P R, Waters J W. ApJ, 1971, 168: L101.
[24] Chui M F, Cheung A C, Matsakis D, et al. ApJ, 1974, 187: L19.
[25] Menten K M. ApJ, 1991, 380: L75.
[26] Wilson T L, Batrla W, Pauls T A. Astron. Astrophys, 1982, 110: L20.
[27] Madden S C, Irvine W M, Matthews H E, et al. ApJ, 1986. 300: L79.
[28] Hermsen W, Wilson T L, Walmsley C M, et al. A&A, 1988, 201: 285.
[29] Guilloteau S, Omont A, Lucas R. A&A, 1987, 176: L24.
[30] Lucas R, Cernicharo J. Astro Astrophys, 1989, 218: L20.
[31] Likkel L, Morris M. ApJ, 1988, 329: 914.
[32] Te Lintel Hekkert P, Habing H J, Caswell J L, et al. A&A, 1988, 202: L19.
[33] Likkel L, Morris M, Maddalena R J. A&A, 1992, 256: 581.

[34] Martin-Pintado J, Thum C, Bachiller R. A&A, 1989, 222: L9.
[35] Whiteoak J B, Gardner F F. Astroph Lett, 1973, 15: 211.
[36] Nguyen-Q-Rieu, Mebold U, Winnberg A, et al. A&A, 1976, 52: 467.
[37] Churchwell E, Witzel A, Pauliny-Toth I, et al. A&A, 1977, 54: 969.
[38] Baan W A, Wood P A D, Haschick A D. ApJ, 1982, 260: L49.
[39] a. Henkel C, Guesten R, Wilson T L, et al. A&A, 1984, 141: L1.
b. Haschick A D, Baan W A, Schneps M H, et al. ApJ, 1990, 356: 149.
[40] Henkel C, Baan W A, Mauersberger R. A&A Rev, 1991, 3: 47.
[41] Baan W A. In: Clegg A W, Nedoluha G E, ed. Astrophysical Masers. Berlin: Springer, 1993. 73.
[42] Perkins F, Gold T, Selpeter E E. ApJ, 1966, 145: 361.
[43] Litvak M M, McWhorter A L, Meeks M L, et al. Phys Rev Lett, 1966, 17: 821.
[44] Goldreich P, Keeley D A. ApJ, 1972, 174: 517.
[45] Goldreich P, Keeley D A, Kwan J. ApJ, 1973, 179: 111.
[46] Goldreich P, Keeley D A, Kwan J. ApJ, 1973, 182: 55.
[47] Goldreich P, Kwan J. ApJ, 1974, 190: 27.
[48] Anderson N, Genzel R. In: Clegg A W, Nedoluha G E, ed. Astrophysical Masers. Berlin: Springer, 1993. 97.
[49] de Jong T. A&A, 1973, 26: 297.
[50] Strel'Nitskii V S, Syunyaev R A. Sov Astron, 1973, 16: 579.
[51] Furuya R S, Kitamura Y, Saito M, et al. ApJ, 1999, 525: 821.
[52] Emerson D. Interpreting Astronomical Spectra. Chichester: John Wiley and Sons, 1996.
[53] Litvak M M. ApJ, 1971, 170: 71.
[54] Barrett A H, Rogers A F E. Nature, 1966, 210: 188.
[55] Guilloteau S. A&A, 1982, 116: 101.
[56] Dickinson D F, Bechis K P, Barrett A H. ApJ, 1973, 180: 831.
[57] Troland T H, Heiles C, Johnson D R, et al. ApJ, 1979, 232: 143.

[58] Barvainis R, Predmore C R. ApJ, 1985, 288: 694.
[59] McIntosh G C, Predmore C R, Moran J M, et al. ApJ, 1989, 337: 934.
[60] Cook A H. Nature, 1966, 211: 503.
[61] Elitzur M. ApJ, 1991, 370: 407.
[62] Deguchi S, Watson W D. ApJ, 1986, 300: L15.
[63] Nedoluha G E, Watson W D. ApJ, 1990, 354: 660.
[64] Gray M D. In: Clegg A W, Nedoluha G E, ed. Astrophysical Masers. Berlin: Springer, 1993. 37.
[65] Nedoluha G E, Watson W D. In: Clegg A W, Nedoluha G E, ed. Astrophysical Masers. Berlin: Springer, 1993. 47.
[66] 周震浦. 天文学进展, 1985, 3 (1): 55.
[67] Fiebig D, Gusten R. A&A, 1989, 214: 333.
[68] Barvainis R, McIntosh G, Predmore C R. Nature, 1987, 329: 613.
[69] Western L R, Watson W D. ApJ, 1984, 285: 158.
[70] Nedoluha G E, Watson W D. ApJ, 1988, 335: L19.
[71] Deguchi S, Watson W D. In: Clegg A W, Nedoluha G E, ed. Astrophysical Masers. Berlin: Springer, 1993. 29.
[72] Andresen P, Ondrey G S, Titze B, et al. J Chem Phys, 1984, 80: 2 548.
[73] Liu, H P, Xu L H, Sun J. J IR&MW, 2000, 21 (8): 395.
[74] Strel'Nitskii V S. MNRAS, 1984, 207: 339.
[75] Litvak M M. Science, 1969, 165: 855.
[76] Goldreich P, Kwan J. ApJ, 1974, 191: 93.

附录 I 已发现和证认的星际和星周分子表(2002 年以前)

说明:

(1)此表是在李守中等《1990 年底前已发现和证认的星际和拱星分子》(天文学进展,1991,9,(4):321)的基础上补充而成,按化学性质分类列出并标出中、英文化学命名。表中 128 种分子主要是根据参考资料[1]、[2]、[12],并与过去发表的各种星际及星周分子表(参考资料[3]~[11]、[13]),以及 1991 年以后的有关期刊进行了核对、补充。

(2)符号"*"表示迄今只在演化星的星周包层中检测到的分子。

(3)不少化学分子的命名不是惟一的。本表中包括了见于文献中的不同英文命名,并将相应的各中文命名对应地列出(若同一中(英)文名称对应两种英(中)文名称则用圆括号标出)。我们认为欠妥的英文命名下加以波纹线。英文命名下加有横线的是国外文献中尚未见到的、我们按化学命名规则给出的英文命名。目前无法命名的用符号"?"表示。

(4)表中列出的年份大都是指首次检测到该分子的文献发表时的年份。个别分子没有找到原始文献则只注明大约的发现时间。但请注意有些文章中所说的"发现年份"是指首次观测到分子时的年份,另有些文章中是指谱线得到最后证认的年份。故发现年份只能作为参考。

(5)表中最后一列是引文号。大都是指首次检测到该分子的原始文献。未查到原始文献的则注明见于何种分子表。20 世纪 70 年代以前发现的分子因原始文献均可在[13]中查到,故只注明[13]。

(6)在已发现的 120 多种天文分子中,有不少还观测到相应的同位素分子。本表中除含同位素氘的分子外,其它均未列入。

(7)有关分子天体物理学的更多信息读者可以在下列等网址上进行搜索:

http://www.strw.leidenuniv.nl/~iau34/links.html

http://www.cv.nrao.edu/~awootten/allmols.html

(8)在天文分子的分类、命名工作中,北京大学的张滂院士,叶秀林教授,李崇熙教授,林垚教授,林新村教授等给予了仔细认真的指导和讨论,他们的热情支持对这个分子表的完成有决定性的作用,在此表示由衷的感谢。

已发现和证认的星际分子和星周分子表(2002 年以前)

简单分子 Simple Molecules				
氢化物 Hydrides				
H_2	分子氢	molecular hydrogen	1970	[13]
HCl	氯化氢	hydrogen chloride	1985	[14]
H_2O	水	water	1968	[13]
氧化物 Oxides				
CO	一氧化碳	carbon monoxide	1970	[13]
SiO	一氧化硅	silicon monoxide	1971	[13]
SO_2	二氧化硫	sulfur dioxide	1975	[13]
OCS	硫化羰,硫氧化碳	carbonyl sulfide, carbon thiodioxide	1971	[13]
HNO	(次硝酸)	(nitroxyl, nitroxyl hydride, hyponitrous acid)	1977	[13]
N_2O	一氧化二氮	nitrous oxide	1994	[47]
硫化物 Sulfides				
CS	一硫化碳	carbon monosulfide	1971	[13]
SiS	一硫化硅,硫化硅	silicon monosulifide, silicon sulfide	1975	[13]
H_2S	硫化氢	hydrogen sulfide	1972	[13]

续表

卤化物 Halides				
NaCl*	氯化钠	sodium chloride	1987	[15]
AlCl*	一氯化铝	aluminium monochloride, aluminum chloride	1987	[15]
KCl*	氯化钾	potassium chloride	1987	[15]
AlF*	一氟化铝	aluminium monofluoride, aluminum fluoride	1987	[15]
HF	氟化氢	hydrogen fluoride	1997	[69]
其它 Others				
NH_3	氨	ammonia	1968	[13]
SiH_4*	四氢化硅，硅甲烷，硅烷	silicon tetrahydride, silico-methane, silane	1984	[16]
CC	（双原子碳）	(diatomic carbon, dicarbide, carbon dimmer)	1977	[13]
CH_4	甲烷	methane	1978	[13]
PN	氮化磷	phosphorus nitride	1987	[17]
炔衍生物 Acetylene Derivatives				
HC≡C—CN	（氰基乙炔），丙炔腈	(cyanoethyne, cyanoacetylene)	1970	[13]
$H(C{\equiv}C)_2$—CN	（氰基丁二炔）	(cyanobutadiyne, cyanodiacetylene)	1976	[13]

续表

$H(C\equiv C)_3-CN$	(氰基己三炔)	(cyanohexatriyne, cyanotriacetylene)	1977	[13]
$H(C\equiv C)_4-CN$	(氰基辛四炔)	(cyanooctatetrayne, cyanotetraacetylene)	1978	[13]
$H(C\equiv C)_5-CN$	(氰基癸五炔)	(cyanodecapentayne, cyanopentaacetylene) cyanoletracetylene	1982? 1997	[18]
$HC\equiv CH$	乙炔	acetylene	1976	[13]
$H_3C-C\equiv CH$	丙炔,甲基乙炔	propyne, methyl acetylene	1973	[13]
$H_3C-(C\equiv C)_2-H$	1,3-戊二炔,戊-1,3-二炔甲基二乙炔	1,3-pentadiyne, penta-1, 3-diyne, methyl diacetylene	1984	[19]
HCCNC	异氰乙炔	isocyanoacetylene, ethinylisocynide	1992	[48]
烯 Ethylene				
$H_2C=CH_2$*	乙烯	ethylene, methyldiacetylene	1981	[20]
酸 Acids				
$HN=C=O$	异氰酸	isocyanic acid	1971	[13]
$HN=C=S$	(异硫氰酸)	(isothiocyanic acid, thioisocyanic)	1979	[13]
$HO-CH=O$	(甲酸,蚁酸)	(formic acid, methanoic acid)	1970	[13]
CH_3COOH	(乙酸,醋酸)	(acetic acid)	1997	[67]

续表

NH_2CH_2COOH	（甘氨酸 氨基醋酸）	(glycine)	1994	[68]
醇 Alcohols				
H_3COH	（甲醇）	(methanol, methyl alcohol)	1970	[13]
$H_3C—CH_2—OH$	（乙醇）	(ethanol, ethyl alcohol)	1974	[13]
H_3CSH	（甲硫醇）	(methanethiol, methyl mercaptan)	1979	[13]
$HOCH_2CH_2OH$	乙二醇	ethylene glycol	2002	[70]
醣 Carbon hydrate				
CH_2OHCHO	羟基乙醛	Glycolaldehyde	2000	[71]
醚 Ethers				
$H_3C—O—CH_3$	二甲醚	dimethyl ether	1974	[13]
醛 Aldehydes				
$H_2C=O$	甲醛	Formaldehyde	1969	[13]
$H_2C=S$	硫代甲醛	Thioformaldehyde	1971	[13]
$H_3C—CH=O$	乙醛	Acetaldehyde	1971	[13]
$HC\equiv CCHO$	丙炔醛	propiolaldehyde, porpynal	1988	[21]

续表

酯 Esters				
$H_3C—O—CH=O$ ($HCOOCH_3$)	甲酸甲酯	methyl formate	1975	[13]
酮 Ketones				
$H_2C=C=O$	乙烯酮	Ketene	1977	[13]
$CH_3—CO—CH_3$	丙酮	Acetone	1987	[12]
酰胺 Amids				
$NH_2—CH=O$	甲酰胺	Formamide	1971	[13]
H_2CNH	甲亚胺	Methanimine	1972	[13]
H_3CNH_2	甲胺	Methylamine	1974	[13]
H_2NCN	氰胺	Cyanamide	1975	[13]
腈 Cyanides				
HCN	(氰化氢,氢氰酸)	(hydrogen cyanide)	1970	[13]
HNC	异氰化氢	hydrogen isocyanide	1971	[13]
H_3CCN	乙腈,甲基氰	acetonitrile, methyl cyanide	1971	[13]
H_3CNC	甲基异氰	methyl isocyanide	1984	[22]

续表

$H_3C—C≡C—CN$	甲基氰基乙炔，2-丁炔腈	methyl cyanoacetylene，2-butynonitrile	1980	[23]
$H_3C—(C≡C)_2—CN$	己二炔腈	Hexadiynonitrile	1984	[24]
$H_3C—CH_2—CN$	乙基氰，丙腈	ethyl cyanide，propionitrile	1977	[13]
$H_2C═CH—CN$	乙烯基氰，丙烯腈	vinyl cyanide，acrylonitrile	1975	[13]
NaCN*	氰化钠	sodium cyanide	1994	[49]
环状分子 Cyclic Molecules				
$c\text{-}C_3H_2$	亚环丙烯基	Cyclopropenylidene	1985	[25]
$c\text{-}SiC_2$	亚硅杂环丙炔基 二碳化硅	silacyclopropynolidene silacyclopropyne，silicon dicarbide	1984	[26]
$c\text{-}C_3H$	环丙炔基	cyclopropynyl	1985	[1，2]
$c\text{-}C_2H_4O$	氧化乙烯，环氧乙烷	ethylene oxide	1997	[72]
离子 Ions				
CH^+	次甲基正离子	methylidyne ion	1937	[13]
HN_2^+	质子化氮分子，二氮烯基正离子	Protonated nitrogen，Diazenylium	1974	[13]
HCO^+	甲酰基正离子	formyl ion	1970	[13]

续表

$HOCO^+$	质子化二氧化碳	protonated carbon dioxide	1981	[27]
HCS^+	硫甲酰基正离子	thioformyl ion, thioformylium	1981	[27]
$HCNH^+$	质子化氢氰酸	protonated hydrogen cyanide	1986	[28]
SO^+	一氧化硫正离子	sulfur monoxide ion	1986	[29]
H_3O^+	质子化水,水合质子	protonated water, protonated hydrate	1986	[30]
HOC^+	异甲酰基正离子	isoformyl ion	1983	[31]
H_2D^+	质子化氘代氢分子	protonated deuterohydrogen	1985	[32]
NH_2^+	氨基正离子	amino ion	1993	[50]
$HCCCNH^+$	质子化丙炔腈	protonated cyanoacetylene	1994	[51]
H_2COH^+	质子化甲醛	protonated formaldehyde	1996	[62]
H_3^+	质子化氢分子	protonated hydrogen	1996	[63]
CO^+	(一氧化碳正离子)	(carbon monoxide ion, carboncation)	1993	[73]
CH_2D^+	氘代甲基正离子	monodeuterated methyl	1993	[74]
基 Radicals				
OH	羟基	hydroxyl radical	1963	[13]
CH	次甲基	methylidyne radical	1937	[13]

续表

C_2H	乙炔基	ethynyl radical	1974	[13]
C_3H,l-C_3H	次炔丙基	propynlidyne radical, propynyl radical	1984	[13]
C_4H	丁二炔基	butadiynyl radical	1978	[13]
C_5H	次戊二炔基	pentadiynlidyne radical, pentynylidyne radical	1986	[34]
C_6H	己三炔基	hexatriynyl radical	1987	[35]
CN	氰基	cyanogens radical	1940	[13]
C_3N	氰乙炔基	cyanoethynyl radical	1977	[13]
H_2CCN	氰甲基	cyanomethyl radical	1988	[36]
HCO	甲酰基	formyl radical	1976	[13]
NO	一氧化氮基	nitric oxide radical	1978	[13]
SO	一氧化硫基	sulfur monoxide radical	1973	[13]
CP^*	碳化磷基	phosphorus carbide radical	1990	[52]
NS	(硫化氮基)	(nitrogen sulfide radical, nitric sulfide radical)	1975	[13]
SiC^*	碳化硅基	silicon carbide radical	1989	[37]
SiN^*	氮化硅基	silicon nitride radical	1990	[12]
SiH_2	亚甲硅基,二氢化硅	silylene radical	1990	[12]

续表

NH	氢化氮基	nitrogen hydride radical	1991	[53]
$HCCN^*$	?	?	1991	[54]
HNCCC	亚胺丙炔基	propynylimide radical	1992	[55]
$MgNC^*$	异氰化镁基	magnesium isocyanide radical	1993	[56]
NH_2	氮基	amino radical	1993	[57]
H_2CN	亚甲胺基	methylene amidogen radical	1994	[58]
C_7H	次庚三炔基	heptatriynlidyne radical	1997	[65]
C_8H	辛四炔基	octatetraynyl radical	1996	[64]
SH^*	(巯基,氢硫基)	(mercapto radical) sulfur hydride	2000	[75]
$MgCN^*$	氰化镁基	magnesium cyanide radical	1995	[76]
$SiCN^*$	氰化硅基	silicon cyanide, silicon cyanide radical	2000	[77]
$AlNC^*$	异氰化铝基	aluminum isocyanide, aluminum isocyanide radical	2001	[78]
CH_3	甲基	methyl radical	2000	[79]
C_5N	氰基丁二炔基	cyanobutadienyl radical	1998	[80]

续表

碳链分子，碳链卡宾 Carbon Chain Molecules，Carbon Chain Carbenes				
H_2C	卡宾	Carbene	1989	[1]
H_2CCC，l-C_3H_2	丙二烯卡宾	allene carbene，propadienylidene	1991	[59]
H_2CCCC	丁三烯卡宾	tributylene carbene，butatrienylidene	1991	[60]
CCC*	三原子碳链，丙二烯二卡宾	triatomic carbon，allene dicarbene	1988	[38]
CCCCC*	五原子碳链，戊四烯二卡宾	pentatomic carbon，pentatetraene dicarbene	1989	[39]
CCO	乙烯酮卡宾	ketene carbene，dicarbon monoxide	1991	[61]
CCCO	丙二烯酮卡宾，一氧化三碳	allene ketene carbene，tricarbon monoxide	1984	[40]
CCCCCO	戊四烯酮卡宾	pentatetraene ketene carbene	1988-90	[1]
C_2S	硫代乙烯酮卡宾	thioketene carbene	1987	[41]
CCCS	硫代丙二烯酮卡宾	allene thioketene carbene，tricarbon monosulfide	1986	[12]
C_4Si*	1-硅杂戊四烯二卡宾	1-silapentatetraene dicarbene	1989	[42]
H_2C_6	己五烯卡宾	hexapentaenylidene	1997	[66]
S_iC_3	?	?，silicon tricarbide	1999	[81]

附录I　参考资料

[1] A table sent by FCRAO (2-28-1990).

[2] Ohishi M. Molecular Line Survey at Nobeyama, Workshop on Star Forming Regions (10-24-1990, Huang-Shan, China.)
Ohishi M. Observations of "hot cores", in: van Dishoeck E F, ed. Molecules in Astrophysics: Probers and Processes (IAU Symposium No. 178). Dordrecht: Kluwer Acad Publ, 1997. 61.

[3] Friberg P, Hjalmarson A. Molecular Clouds in the Milky Way, in Molecular Astrophysics-a Volume Honouring Alexander Dalgarno, ed. by Hartquist T W. 1990. 23.

[4] Winnewisser G. Sterne und Weltraum, 1985,24 : 16.

[5] 英汉天文学词汇．第 2 版．1986. 346.
[English-Chinese Dictionary of Astronomy. 2nd edition. 1986. 346].

[6] A table sent by Dalgarno A. 1987.

[7] Irvine W M et al. Chemical Abundances in Molecular Clouds, in Interstellar Processes, ed. by Hollenbach D J and Thronson H A, Jr. 1987. 576.

[8] Rydbeck O E H, Hjalmarson A. Radio Observations of Interstellar Molecules, in Molecular Astrophysics-State of the Art and Future Directions, ed. by Diercksen G H F et al. 1985. 132.

[9] Lovas F J. Recommended Rest Frequencies for Observed Interstellar Molecular Microwave Transitions-1984 Revision. 1984.

[10] Olofsson H. Molecular Radio Line Observations of Mass Loss from Red Giants, invited review at IAU Coll. No. 106. in Evolution of Peculiar Red Giants, ed. by Johnson H R and Zukerman. B 1988. 321.

[11] Jura M. Chemistry in the Circumstellar Envelopes around Mass-losing Red Giants, in Molecular Astrophysics-a Volume Honouring Alexander Dalgarno, ed. by Hartquist. T W 1990. 428.

[12] Verschuur G L. Sky and Telescope, 1992. 379.

[13] Mann A P C, Williams D A. Nature, 1980,283:721.
[14] Blacke G A et al. Ap J,1985, 295:501.
[15] Cernicharo J, Guelin M. Astro Astrophys, 1987, 183:L10.
[16] Goldhaber D M, Batz A L. Ap J (Lett), 1984,279: L55.
[17] Turner B E, Bally J. Ap J (Lett), 1987,321:L75;
Ziurys L M. Ap J (Lett), 1987,321:L81.
[18] Bell M B et al. Nature, 1982,295:389.
Bell M B et al. Ap J (Lett),1997,483: L61.
[19] Walmsley C M et al. Astron Astrophys, 1984, 134:L11.
[20] Batz A L. Ap J (Lett), 1981,244:L103.
[21] Irvine W M et al. Ap J (Lett), 1988,335: L89.
[22] Irvine W M, Schloerb F P. Ap J, 1984,282:516.
[23] Langer W D et al. Ap J (Lett), 1980,239: L125.
[24] Snyder L E et al. Bull Am Astron Soc, 1984,16: 959.
[25] Thaddeus P et al. Ap J (Lett), 1985,299:L63;
Matthews H E, Irvine W M. Ap J (Lett), 1985,298:L61.
[26] Thaddeus P et al. Ap J (Lett), 1984,283:L45.
[27] Thaddeus P et al. Ap J (Lett), 1981,246:L41.
[28] Ziurys L M, Turner B E. Ap J (Lett), 1986,302:L31.
[29] Churchwell E et al. Ap J, 1986,305:405.
[30] Wootten A et al. Astron Astrophys, 1986,166:L15.
[31] Woods R C et al. Ap J, 1983,270:583.
[32] Philips T G et al. Ap J (Lett), 1985,294:L45.
[33] Johansson L E B et al. Astron Astrophys, 1984,130:227.
[34] Cernicharo J et al. Astron Astrophys,1986,164:L1.
[35] Guelin M et al. Astron Astrophys, 1987,175:L5.
[36] Irvine W M et al. Ap J (Lett),1988,334:L107.
[37] Cernicharo J et al. Ap J (Lett), 1989,341:L25.
[38] Hinkle K H et al. Science,1988,241:1 319.
[39] Bernath P F et al. Science,1989,244:562.
[40] Matthews H E et al. Nature,1984,310:125.

[41] Cernicharo J et al. Astron Astrophys, 1987, 181:L9.
[42] Ohishi M et al. Ap J (Lett), 1989,345:L83.
[43] Hollis J M, Rhodes P J. Ap J (Lett),1982,262:L1.
[44] Nuth J A, Moore M H. Ap J (Lett), 1988,329: L113.
[45] Ohishi M et al. Ap J, 1988,329:511.
[46] Guelin M et al. Astron Astrophys, 1986,157:L17.
[47] Ziurys L M et al. Ap J (Letter), 1994,436:L81.
[48] Kawaguchi K et al. Ap J (Letter), 1992,386:L51.
[49] Turner B E et al. Ap J (Letter), 1994,426:L97.
[50] Olofsson H.《Molecular Abundance in the Envelopes around Evolved Stars》in The Proceedings of the IAU Coll. No. 146 (Molecular Opcities in the Stellar Evironment). 1993.
[51] Kawaguchi K et al. Ap J (Letter),1994,420:L95.
[52] Guélin M et al. Astron Astrophys, 1990,230:L9.
[53] Meger D M et al. Ap J (Lett), 1991,376:L49.
[54] Guélin M, Cernicharo J. Astron Astrophys, 1991,244:L21.
[55] Kawaguchi K et al. Ap J (Lett), 1992,369:L49.
[56] Ishii K et al. Ap J (Lett), 1993,406:L39;
Guélin M et al. Astron Astrophys,1986,157:L17.
[57] van Dishoeck E F et al. Ap J (Lett), 1993,416:L83.
[58] Ohishi M et al. Ap J (Lett),1994,427:L51.
[59] Cernicharo J et al. Ap J (Lett), 1991,368:L39.
[60] Cernicharo J et al. Ap J (Lett),1991,368:L43.
[61] Ohishi M et al. Ap J (Lett), 1991,380:L39.
[62] Ohishi M et al. Ap J (lett), 1996,471:L61.
[63] Geballe T R, Oka T. Nature, 1996,384:334.
[64] Cernicharo J, Guelin M. Astron Astrophys, 1996,309:L27.
[65] Guélin M et al. Astron Astrophys, 1997,319:L1.
[66] Langer W D et al. Ap J (lett),1997,480:L63.
[67] Mehringer D M et al. Ap J (lett),1997,480:L71.
[68] Miao Y et al. BAAS, 1994,26:906.

[69] Neufeld D A et al. Ap J(lett) 1997,488:L141.

[70] Hollis J M et al. Ap J (lett),2002,571:L59.

[71] Hollis J M et al. Ap J (lett),2000,540:L107.

[72] Dickens J E et al. Ap J (lett), 1997,489:753.

[73] Latter W B et al. Ap J (lett), 1993,419:L97.

[74] The 123 reported interstellar and circumstellar molecules. Updated 2002 Apr 11 by HAW.
(网址:http://www.cv.nrao.edu/~awootten/allmols.html)

[75] Yamamura I et al. Ap J (lett),2000,528:L33.

[76] Ziurys L M et al. Ap J (lett),1995,445:L47.

[77] Guélin M et al. Astron Astrophys,2000,363:L9.

[78] Ziurys L M et al. AAS, 2001,198:1 407.

[79] Feuchtgruber H et al. Ap J (lett),2000,535:L111.

[80] Guelin M et al. Astron Astrophys,1988,335:L1.

[81] Apponi A J et al. Ap J (lett), 1999,516:L103.

附录Ⅱ 主要星际分子的分子参数表

符号说明：

A, B, C	分子的转动常数
Ia,...	相对所标明主轴的转动惯量（AMU A^2）
$\Delta, D, \tau, \delta, R_6$	四次的离心瓦解常数(kHz)
Y_{ij}	在转动和振动能级的下列表达式

$$E_{v,j}=h\sum_{l,m}Y_{l,m}\left(v+\frac{1}{2}\right)^{l}[J(J+1)]^{m}$$ 中的 Dunham 系数

a, b, c	相应于转动常数 A, B, C 的主轴
eqQ_a... χ_a...	沿所标明主轴的核电四极耦合常数
C_X	和核 X 有关的自旋-转动超精细耦合常数(kHz)
$\mu_{a,b,c}$	沿主轴 a, b, c 的电偶极矩分量(Debye)
v	振动态量子数
A_v	振动态 v 的自旋-轨道耦合常数
λ_0	在振动态 $v=0$ 时的电子自旋-自旋耦合常数
τ_0	在振动态 $v=0$ 时的电子自旋转动耦合常数
ρ_0	对($\lambda_v=0$ 的离心瓦解常数
b, c	电子自旋-核自旋间的超精细耦合常数
F	包括核自旋的总角动量量子数(未特别说明时，指的是具有最大 χ_a 或 eqQ 的核)
J	除电子自旋外的总转动角动量量子数
K	J 在对称轴上的投影
N	转动角动量量子数．在洪德(a)和洪德(b)间的中间情况里，这是一个近似的量子数
I	核自旋角动量量子数
J_{KaKc}	不对称陀螺分子的能级标记

(附录Ⅱ内容选自："Winnewisser G, Churchwell E, Walmsley C M. Astrophysics of interstellar molecules. In : Chantry G W, ed. Modern aspects of microwave spectroscopy. London : Academic Press Inc, 1979. 313.)

分子参数表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
A. 封闭壳层的双原子分子						
$^{28}Si^{16}O$	$Y_{01}=21\ 787.453(11)$	$-Y_{02}=29.38(13)$		3.098 2(10)	10.51	[1,2]
		$-Y_{11}=151\ 026$				[3]
		$Y_{21}=70.5(24)$				
$^{29}Si^{16}O$	$Y_{01}=21\ 514.046(13)$	$-Y_{02}=28.64(13)$				
		$-Y_{11}=148\ 193(11)$				
		$Y_{21}=68.7(24)$				
$^{28}Si^{32}S$	$Y_{01}=9\ 099.536\ 9(15)$	$-Y_{02}=0\ 006.016(70)$		1.73(6)		[4]
		$-Y_{11}=44\ 161.7(15)$				
		$-Y_{21}=0\ 002.57(39)$				
$^{12}C^{16}O$	$B_0=57\ 635.968\ 7(26)$	$D_0=183.567(70)$		0.112(5)	14.01	[3]
$^{12}C^{17}O$	$B_0=56\ 179.983(25)$	$D_0=174.39(01)$	4.52(69)			
			$C_{17O}=24.6$			
$^{13}C^{16}O$	$B_0=55\ 101.021(12)$	$D_0=167.745(96)$				

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
$^{12}C^{18}O$	B_0=54 891.424(12)	D_0=166.462(95)				
$^{13}C^{18}O$	B_0=52 356.011(12)	D_0=151.405(87)				
$^{12}C^{32}S$	B_0=24 495.575(10)	D_0=40.24(57)		1.958(5)	11.8	[3]
$^{12}C^{33}S$	B_0=24 293.339(6)	D_0=39.57(56)	12.835(33) C_S=18.7(37)			
$^{12}C^{34}S$	B_0=24 103.551(12)	D_0=38.77(78)				
$^{13}C^{32}S$	B_0=23 123.808(20)	D_0=35.85(51)				
B. 线形分子						
$^{16}O^{12}C^{32}S$	B_0=6 081.492 39(12)	1.301 80(14)	—	0.715 19(3)	11.17	[5]
$H^{12}C^{14}N$	B_0=44 315.975 7(4)	87.24(6)	−4.707 89(8) C_N=10.13(3)	2.984 5(15)	13.8	[5]
$H^{13}C^{14}N$	B_0=43 170.140(20)	83.8(40)		—		[6]
$H^{12}C^{15}N$	B_0=43 027.644(20)	81.9(40)	—	—		[6]

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
$D^{12}C^{14}N$	B_0=36 207.462 7(2)	57.83(4)	N=−4.703 96 (47) D=202.23(50) C_N=8.23(18)	2.990 2(20)		[5,6]
$H^{14}N^{12}C$	B_0=45 331.999(40)	D_0=101.2(50)		3.05(10)		[6,8]
$H^{14}N^{13}C$	B_0=43 545.616(40)	D_0=95.5(50)	290(40)			[7,9,69]
HCO^+	$2B_0-4D_0$= 89 188.545(20)		—	3.3	(~9.88)	[10]
	B_0=44 594.448(15)	D_0=87.9(4.8)		(SCF calc.)		
$H^{13}CO^+$	$2B_0-4D_0$= 86 754.341(5)					[16]
DCO^+	$2B_0-4D_0$=89 188.6					[16]
N_2H^+	$2B_0-4D_0$= 93 173.392(31)		Outer N −5.666(12) Inner N −1.426(21)	3.4(5)		[11,12,13]

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
			C_N=0.014 7(23)			
C_2H　$X^2\Sigma$	$2B_0-4D_0$= 87 348.74(19) γ=−62.57(13) b=40.24(43) c=12.23(35)			0.8(2)		[14,15]
C_3N　$X^2\Sigma$	B_0=4 947.66(15) $\|\gamma\|$=18.7(5)	D_0=1(1)				[67,68]
$H^{12}C^{12}C^{12}C^{14}N$	B_0=4 549.057 9(4)	0.543 11(45)	−4.318 7(20) C_N=0.94(39)	3.72(4)		[16,17]
$H^{13}C^{12}C^{12}C^{14}N$	B_0=4 408.442 6(7)	0.510 74(112)	−4.289(40)			[17]
$H^{12}C^{13}C^{12}C^{14}N$	B_0=4 529.761 7(10)	0.543 33(160)	−4.287(40)			[17]
$H^{12}C^{12}C^{13}C^{14}N$	B_0=4 530.197 8(3)	0.540 95(38)	−4.299(40)			[17]
HC_5N	B_0=1 331.331 3(1)	0.025 7(2)	−4.242(30)	4.33(3)		[18,19]
HC_7N	B_0=564.000 74(16)	0.003 82(87)	(−4.120)	(4.9)		[68]

续表

分子		B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
C. 开放壳层的双原子分子							
OH	$X^2\Pi$	$B_0=556\ 140$	291.769(12)	—	1.660(10)	13.36	[50,51,52]
		$A_v=-416.350\ 8(360)$					
		$A_v/B_v=-7.5$					
SO	$X^3\Sigma$	$B_0=21\ 523.561(10)$	34.2(2)		1.55(2)	12.1	[53]
		$\lambda_0=158\ 258.71(2.4)$	$\rho_0=297(100)$				
		$\gamma_0=-168.79(30)$					
^{34}SO	$X^3\Sigma$	$B_0=21\ 102.722(26)$	32.8(2)				
		$\lambda_0=158\ 260.6(9.8)$	$\rho_0=287(30)$				
		$\gamma_0=-166.2(1.1)$					
NS	$X^2\Pi_{1/2}$	$B_{0eff}=23\ 072.10(13)$			1.82(2)		[54,55,56]
	$X^2\Pi_{3/2}$	$B_{0eff}=23\ 238.61(18)$					
	$X^2\Pi$	$B_{0eff}=23\ 156.01(16)$	28(2)	−2.86(31)			

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
	$A_0=222.94(17)$					
CH $X^2\Pi$	$B_0=14.162\ cm^{-1}$			$(^2\Pi_{1/2})1.46(6)$	10.64	[57,58]
CN $X^2\Sigma$	$B_0=56\ 693.1(3)$		$-1.27(5)$	1.45(8)	14	[59,60,61]
	$\gamma_0=217.1(5)$		$C_N=5(7)$			
	$b_0=-33.97(2)$					
	$c_0=60.315(31)$					
D. 对称陀螺分子						
NH_3	298 115.37	$D_J=24\ 310$	$-4.092\ 4(9)$	1.476(2)	10.2	[42,43]
		$D_{JK}=-45\ 270$				[44]
	$\nu(inv)=23\ 785.910$					[62]
CH_3CN	9 198.897(6)	$D_J=3.807(75)$	$-4.214(16)$	3.913(2)	12.2	[45,46,47]
		$D_{JK}=176.91(19)$				
CH_3CCH	8 545.869	$D_J=2.875$	—	0.7804	10.36	[48,49]
		$D_{JK}=163$				

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
E. 非对称陀螺分子						
H_2O	$A=835\ 840.288(1.0)$	$\Delta_J=37\ 594.22(49.0)$		$\mu_b=1.854\ 6(4)$	12.61	[20]
	$B=435\ 351.717(900)$	$\Delta_{JK}=-172\ 912.8(340.0)$				
	$C=278\ 138.700(900)$	$\Delta_K=973\ 290.52(190.0)$				
		$\delta_J=15\ 210.40(20.0)$				
		$\delta_K=41\ 050.2(300.0)$				
HDO	$A=701\ 931.502(220)$	$\Delta_J=10\ 837.49(5.80)$		$\mu_a=0.656\ 7(4)$		[20]
	$B=272\ 912.599(110)$	$\Delta_{JK}=34\ 207.29(37.0)$		$\mu_b=1.731\ 8(9)$		
	$C=192\ 055.245(100)$	$\Delta_K=377\ 078.28(260)$				
		$\delta_J=3\ 647.126(1.4)$				
		$\delta_K=63\ 087.50(35.0)$				
H_2S	$A=310\ 182.24(60)$	$\Delta_J=49\ 851.31(38)$		$\mu_b=0.974(5)$	10.47	[21]
	$B=270\ 884.05(51)$	$\Delta_{JK}=-159\ 695.66(69)$				
	$C=141\ 705.88(51)$	$\Delta_K=111\ 850.5(68)$				

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
		$\delta_J=6\ 019.08(50)$				
		$\delta_K=262\ 165.4(2\ 100)$				
SO_2	$A=60\ 778.516$	$\tau_{aaaa}=39.9$		$\mu_b=1.59(1)$	12.34	[22]
	$B=10\ 317.963$	$\tau_{bbbb}=-12.8$				
	$C=8\ 799.808$	$\tau_{cccc}=-9\ 878.6$				
		$\tau_1=386.3$				
		$\tau_2=590.3$				
HNO	$A=553\ 903.0(2.7)$	$D_J=121.6(3)$	$\chi_{aa}=0.36(56)$	$\mu_a=1.03(1)$		[67]
	$B=42\ 308.52(10)$	$D_{JK}=2\ 940(60)$	$\chi_{bb}=-5.46(30)$	$\mu_b=1.31(2)$		
	$C=39\ 169.46(10)$	$D_K=134\ 000(6\ 000)$	$\chi_{cc}=5.10(26)$			
HCO	$B=44\ 777.4(5)$	$D=49(19)$		1.959	9.88	[63,64]
	$C=41\ 941.0(5)$					
H_2CO	$A=281\ 970.572(24)$	$\Delta_K=19\ 423(7)$		$\mu_a=2.331(30)$	10.88	[65]
	$B=38\ 836.045\ 5(13)$	$\Delta_{JK}=1\ 290.50(37)$				

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
	$C=34\ 002.203\ 4(12)$	$\Delta_J=75.295(21)$				
		$\delta_K=1026.03(25)$				
		$\delta_J=10.4567(9)$				
$H_2{}^{13}CO$	$A=281\ 993.257(135)$	$\Delta_K=19\ 499(22)$				[65]
	$B=37\ 811.088\ 6(25)$	$\Delta_{JK}=1\ 257.48(64)$				
	$C=33\ 213.978\ 9(25)$	$\Delta_J=71.525(61)$				
		$\delta_K=987.44(1.0)$				
		$\delta_J=9.631(2)$				
$H_2C^{18}O$	$A=282\ 029(35)$					[23]
	$B=36\ 904.1(3)$					
	$C=32\ 513.0(3)$					
H_2CS	$A=291\ 660.05(50)$	$\tau_{aaaa}=-139\ 810$ (18 000)		$\mu_a=1.647\ 4(14)$		[23]
	$B=17\ 699.555\ 1(56)$	$\tau_{bbbb}=-89.49(64)$				
	$C=16\ 653.062\ 1(56)$	$\tau_{cccc}=-69.79(63)$				

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
		$\tau_1=-2\ 321.2(2.4)$				
		$\tau_2=0.184\ 6(6)$				
HNCO	$A=912\ 712.288(136)$	$D_J=3.517(3)$	$\chi_{aa}=2.0527(10)$	$\mu_a=1.575(5)$		[24]
	$B=11\ 071.010\ 27(62)$	$D_{JK}=933.76(64)$	$\chi_{bb}=-0.473(7)$	$\mu_a=1.35(10)$		
	$C=10\ 910.577\ 48(64)$	$\delta_J=0.073\ 0(9)$	$\chi_{cc}=-1.583(7)$			
		$R_6=-0.022\ 6(2)$				
H_2CNH	$A=196\ 211.046(45)$	$\tau_{aaaa}=-28\ 152(13)$	$\chi_{aa}=-0.899(28)$	$\mu_a=1.325(20)$		[25]
	$B=34\ 642.395\ 6(72)$	$\tau_{bbbb}=-319.85(48)$	$\chi_{bb}=-2.653(19)$	$\mu_b=1.53(4)$		
	$C=29\ 352.232\ 6(69)$	$\tau_{cccc}=-160.24(36)$	$\chi_{cc}=+3.553(21)$			
		$\tau_1=-3\ 017.4(8.2)$				
		$\tau_2=-481.04(1.3)$				
H_2NCN	$A=310\ 885(450)$	$\tau_{bbbb}=-19.1(3.2)$	$\chi_{aa}=3.05(2)$	$\mu_a=4.32(80)$		[26,27]
	$B=10\ 130.162(30)$	$\tau_{cccc}=-16.6(3.2)$	$\chi_{bb}=1.85(2)$			[28]
	$C=9\ 866.422(30)$	$\tau_1=-1\ 912(10)$	$\chi_{aa}(CN)=-3.30(2)$			

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
		$\tau_2=74.3(7.4)$	$\chi_{bb}(CN)=2.86(2)$			
HCOOH*trans*	$A=77\ 512.232(21)$	$\Delta_J=9.990\ 2(44)$		$\mu_a=1.396$	11.33	[29,30]
	$B=12\ 055.106\ 1(30)$	$\Delta_{JK}=-86.32(10)$		$\mu_b=0.26$		
	$C=10\ 416.115\ 7(27)$	$\Delta_K=1\ 702.1(6)$				
		$\delta_J=1.945\ 6(22)$				
		$\delta_K=43.09(42)$				
HCOOH*cis*	$A=86\ 461.565(22)$	$\Delta_J=8.353(35)$		$\mu_a=2.65$		[30]
	$B=11\ 689.176\ 7(30)$	$\Delta_{JK}=-71.07(77)$		$\mu_b=2.71$		
	$C=10\ 283.986\ 8(30)$	$\Delta_K=2\ 357.2(45)$				
		$\delta_J=1.418\ 5(22)$				
		$\delta_K=41.102(82)$				
H_2C_2O	$A=282\ 081(12)$	$D_J=3.394(33)$		$\mu_a=1.414$	9.60	[66]
	$B+C=$ 20 209.211 8(87)	$D_{JK}=476.04(41)$				

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
	$B-C=378.732\ 6(84)$	$D_K=23\ 535(869)$				
		$D_1(\delta_J)=0.145\ 3(30)$ $D_2(R_5)=-164.8$ (1.3)				
NH_2CHO	$A=72\ 716.949\ 6(22)$	$\tau_{aaaa}=-5\ 373(15.0)$	$\chi_{aa}=1.98(3)$	$\mu_b=3.616(10)$		[23]
	$B=11\ 373.454\ 1(39)$	$\tau_{bbbb}=-44.07(20)$	$\chi_{bb}=1.87(2)$	$\mu_b=0.852(10)$		
	$C=9\ 833.904\ 2(36)$	$\tau_{cccc}=-18.94(17)$	$\chi_{cc}=-3.85(2)$			
		$\tau_1=188.4(3.1)$				
		$\tau_2=2.88(44)$				
H_2CCHCN	$A=49\ 850.697(17)$	$\Delta_J=2.243\ 2(38)$	$\chi_{aa}=-3.69$	$\mu_a=3.68$		[31,32]
	$B=4\ 971.213\ 1(14)$	$\Delta_{JK}=-85.440(36)$	$\chi_{bb}-\chi_{cc}=-0.53$	$\mu_b=1.25$		
	$C=4\ 513.828\ 4(14)$	$\Delta_K=2\ 717(2)$				
		$\delta_J=0.456\ 9(6)$				
		$\delta_K=24.530(120)$				

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
F. 具有内部转动的非对称陀螺分子						
CH_3OH	$I_{a1}=0.753\ 6(110)$ (AMUÅ^2)	$D_J=49(2)$		$\mu_a=0.885$	10.85	[33]
	$I_{a2}=3.206\ 3(130)$	$D_{JK}=286(6)$		$\mu_b=1.440$		
	$I_b=20.477\ 0(15)$	$D_K=1\ 270(60)$				
	$I_c=21.261\ 4(17)$					
	$I_{ab}=-0.065(4)$					
CH_3CHO	$A=56\ 609.474(537)$	$\Delta_J=7.698(73)$		$\mu_a=2.55$	10.23	[34]
	$B=10\ 162.766\ 4(875)$	$\Delta_{JK}=0.976(7921)$		$\mu_b=0.87$		
	$C=9\ 100.412\ 1(864)$	$\Delta_K=678.593(5127)$				
		$\delta_J=1.22(13)$				
		$\delta_K=-135(12)$				
CH_3NH_2	$I_a=22.338\ 5(2)$ (AMUÅ^2)		$\chi_{aa}=2.30$	$\mu_a=0.307$	8.97	[35,36]
	$I_b=23.287\ 0(2)$		$\chi_{bb}=2.02$	$\mu_b=0$		
	$I_c=4.901\ 2(1)$		$\chi_{cc}=-4.32$	$\mu_c=1.258$		

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
	I_z=3.185 0(5)					
	I_{yz}=0.106 5(5)					
$HCOOCH_3$	A=19 985.71 (A species)			μ_a=1.634		[37]
	B=6 914.63 (A species)			μ_b=0.678		
	C=5 304.47 (A species)					
	A=19 980.47 (E species)					
	B=6 913.57 (E species)					
	C=5 304.47 (E species)					
$(CH_3)_2O$	A=38 788.5			μ_a=1.302(10)	9.96	[38,39]
	B=10 056.6					
	C=8 887.9					

续表

分子	B/MHz	D/kHz	eqQ/MHz C/kHz	μ/Debye	电离势能/eV	参考文献
CH_3CH_2OH *trans*	$A=34\ 891.731(66)$			$\mu_a=0.058(0.1)$	10.50	[40,41]
	$B=9\ 350.653(18)$			$\mu_b=1.473(0.1)$		
	$C=8\ 135.216(19)$					
CH_3CH_2CN	$A=27\ 663.661(36)$	$\tau_1=153.23(26)$		$\mu_a=3.84(1)$		[70]
	$B=4\ 714.144\ 1(43)$	$\tau_2=11.69(7)$		$\mu_b=1.37(1)$		
	$C=4\ 235.041\ 2(40)$	$\tau_b=1\ 111(8)$				
		$\tau_{aaaa}=-1\ 995(12)$				
		$\tau_{bbbb}=-17.751(50)$				
		$\tau_{cccc}=-6.787(45)$				

附录Ⅱ 参考资料

[1] Manson E L, Clark, W W, Jr. De Lucia F C, Gordy W. Phys Rev A, 1976,15:223.

[2] Raymonda J W, Muenter J S, Klemperer W. J Chem Phys, A1970,52: 3 458.

[3] Lovas J, Krupenie D H. J Phys Chem Ref Data,1974,3:245.

[4] Tiemann E. J Phys Chem Ref Data 1976,5:1 149.

[5] Maki A G. J Phys Chem Ref Data, 1974,3:221.

[6] Pearson E F, Creswell R A, Winnewisser M, Winnewisser G. Z Naturforsch,1976,31a:1 394.

[7] Creswell R A, Pearson E F, Winnewisser M, Winnewisser G. Z Naturforsch,1976,31a:221.

[8] Blackman G L, Brown R D, Godfrey P D, Gunn H I. Nature, 1976, 261:395.

[9] Saykally R J, Szanto P G, Anderson T G, Woods R C. Astrophys J, 1976,204:L143.

[10] Woods R C, Dixon T A, Saykally R J, Szanto P G. Phys Rev,1975, 35:1 269.

[11] Green S, Montgomery J A, Jr. and Thaddeus P. Astrophys J,1974, 193: L89.

[12] Thaddeus P, Turner B E. Astrophys J,1975,201:L25.

[13] Saykally R J, Dixon T A, Anderson T G, Szanto P G, Woods R C. Astrophys J,1976,205:L101.

[14] Tucker K D, Kutner M L, Thaddeus P. Astrophys J, 1974, 193: L115.

[15] Guelin M, Thaddeus P. Astrophys J,1977,212:L81.

[16] a. Snyder L E, Hollis J M, Lovas F J, et al. ApJ, 209:67.
b. Hollis J M, Snyder L E, Lovas F J, et al. ApJ, 209:L86.

[17] Creswell R A, Winnewisser G, Gerry M C L. J Mol Spectrosc,1977,

65:420.

[18] Winnewisser G, Creswell R A, Winnewisser M. Z Naturforsch,1978, 33a:1 169.

[19] Alexander A J, Kroto H W, Walton D R H. J Mol Spectrosc,1976, 62:175.

[20] De Lucia F C, Helminger P, Kirchhoff W H. J Phys Chem Ref Data, 1974,3:211.

[21] Helminger P, De Lucia F C, Kirchhoff W H. J Phys Chem Ref Data , 1973,2:215.

[22] Steenbeckeliers G. Ann Soc Sci Bruxelles,1968, 82:381;Crable G F, Smith W V. J Chem Phys, 1951,19:502L.

[23] Johnson D R, Lovas F J, Kirchhoff W H. J Phys Chem Ref Data, 1972,1:1 011.

[24] Winnewisser G, Hocking W H, Gerry M C L. J Phys Chem Ref Data, 1976,5:79.

[25]Kirchhoff W H, Johnson D R, Lovas F J. J Phys Chem Ref Data,1973, 2:1.

[26] Johnson D R, Suenram R D, Lafferly W. Astrophys J,1976,208: 245.

[27] MacDonald J N, Taylor D, Tyler J K, Sheridan J. J Mol Spectrosc, 1968,26:285.

[28] Tyler J K, Sheridan J, Costain C C. J Mol Spectrosc,1972,43:248.

[29] Bellet J, Samson C, Steenbeckeliers G, Wertheimer R. J Mol Structure,1971,9:49.

[30] Hocking W H. Z Naturforsch,1976,31a:1 113.

[31] Costain C C, Stoicheff B P. J Chem Phys,1959,30:777.

[32] Gerry M C L, Yamada K, Winnewisser G. J Phys Chem Ref Data, 1977, 8:107.

[33] Lees R M, Lovas F J Kirchhoff W H, Johnson D R. J Phys Chem Ref Data,1976,2:205.

[34] Bauder A, Lovas F J, Johnson D R. J Phys Chem Ref Data,1976,5: 53.

[35] Takagi K and Koijma T. J Phys Soc Japan, 1971, 30: 1 145.
[36] Lide D R, Jr. J Chem Phys, 1952, 20: 1 812; ibid, 1957, 27: 343.
[37] Curl R F. J Chem Phys, 1959, 30: 1 529.
[38] Lovas F J, Johnson D R. Symp Mol Struct Spectr Ohio State Univ, 1975, Paper RB10.
[39] Blukis U, Kasai P M, Myers R J. J Chem Phys, 1963, 38: 2 753.
[40] Culot J P. Austin Symp Gas Phase Mol Struct, 1972. Paper T8.
[41] Takano M, Sasada Y, Satoh T. J Mol Spectrosc, 1968, 26: 157.
[42] Helminger P, De Lucia F C, Gordy W. J Mol Spectrosc, 1971, 39: 94.
[43] Kukolich S G, Wofsy S C. J Chem Phys, 1970, 52: 5 477.
[44] Cohen E A, Poynter R L. J Mol Spectrosc, 1974, 53: 131.
[45] Bauer A, Maes S. J Phys Paris, 1969, 30: 169.
[46] Kemp M K, Pochan J M, Flygare W H. J Phys Chem, 1967, 71: 765.
[47] Stiner A P, Gordy W. J Mol Spectrosc, 1966, 21: 291.
[48] Bauer A, Burie J. C R Acad Sci Paris, 1969, 268B: 800.
[49] Muenter J S, Laurie V W. J Chem Phys, 1966, 45: 855.
[50] Poynter R L, Beaudet R A. Phys Rev Lett, 1968, 21: 305.
[51] Radford H E. Phys Rev, 1961, 122: 114; ibid, 1962, 126: 1 035.
[52] Beaudet R A, Poynter R L. J Phys Chem Ref Data, 1978, 7: 311.
[53] Tiemann E. J Phys Chem Ref Data, 1974, 3: 259.
[54] Amano T, Saito S, Hirota E, Morino Y. J Mol Spectrosc, 1969, 32: 97.
[55] Uehara H, Morino Y. Mol Phys, 1969, 17: 239.
[56] Byfleet C R, Carrington A, Russel D K. Molec Phys, 1971, 20: 271.
[57] Evenson K M, Radford H E, Moran H M. Appl Phys Lett, 1971, 18: 426.
[58] Phelps D H, Dalby F W. Phys Rev Lett, 1966, 16: 3.
[59] Dixon T A, Woods R C. J Chem Phys, 1977, 67: 3 956.
[60] Penzias A A, Wilson R W, Jefferts K B. Phys Rev Lett, 1974, 32: 701.
[61] Turner B E, Gammon R H. Astrophys J, 1975, 198: 71.
[62] Phynter R L, Kakar R K. Astrophys J Suppl. 1975, 29: 87.
[63] Bowater I C, Brown J M, Carrington A. Proc. Roy. Soc. London 1973.

A333, 265.

[64] Austin J A, Levy D M, Gottlieb C A, Radford M E. J Chem Phys, 1974,60:207.

[65] Winnewisser G, Cornet R A, Birss F W, Gordon R M, Ramsay D A, Till S M. J Mol Spectrosc,1979,74: 327.

[66]Johns J W C, Stone J M R, Winnewisser G. J Mol Spectrosc,1972, 42:523.

[67] Saito S, Takagi K. J Mol Spectrosc,1973,47:99.

[68] Kroto H W, Kirby C, Walton D R M, Avery L W, Broten N W, MacLeod J M, Oka T. Astrophys J, 1978(in press).

[69] Frerking M A, Larger W D, Wilson R W. Astrophys J, 1979 (in press).

[70] Johnson D R, Lovas F J. ApJ, 1977, 218:370.